ORSAY
Série A. N°
N° D'ordre : 325

Inscrit aux archives originales
du Centre de Documentation
C.N.R.S. sous le N°
Ao 1499

THESES

présentées

A LA FACULTE DES SCIENCES DE L'UNIVERSITE DE PARIS

Centre d'Orsay

pour obtenir

le Grade de Docteur ès Sciences Physiques

par

Gérard FONTAINE

1ère Thèse : Contribution à l'étude des fautes d'empilement et des macles dans les cristaux.

2ème Thèse : Propositions données par la Faculté.

Soutenues le 12 Mars 1968 devant la Commission d'Examen.

MM. Guinier — Président

Chapelle, Friedel, Haasen — Examinateurs

T H E S E S

présentées

A LA FACULTE DES SCIENCES DE L'UNIVERSITE DE PARIS
Centre d'Orsay

pour obtenir

le Grade de Docteur ès Sciences Physiques

par

Gérard Fontaine

1ère Thèse : Contribution à l'étude des fautes d'empilement et des macles dans les cristaux.

2ème Thèse : Propositions données par la Faculté.

Soutenues le Mars 1968 devant la Commission d'Examen.

MM. Guinier Président

Chapelle
Friedel
Haasen
} Examinateurs

UNIV.
LEIDEN
BIBL.

A mes parents

Digitized by the Internet Archive
in 2026

https://archive.org/details/IA41554024_0010

Ce travail a été accompli dans le Laboratoire de Physique des Solides de la Faculté des Sciences d'ORSAY.

Le Professeur J. FRIEDEL a bien voulu m'accueillir dans son service et stimuler cette recherche. Son aide énergique et bienveillante m'a été d'un grand prix. Qu'il trouve ici l'expression de ma profonde reconnaissance.

A l'occasion d'un stage D.R.M.E., le Professeur R. CASTAING m'a facilité le séjour dans son laboratoire. Je le remercie particulièrement de m'avoir ainsi permis de connaître le groupe de Microscopie Electronique. L'intérêt et la patience de B. JOUFFREY ont favorisé ce contact ; je l'en remercie vivement.

Je remercie également le Professeur G. SAADA et toutes les personnes qui de près ou de loin se sont intéressées à ce travail.

Je ne saurais oublier Monsieur SAINT MARTIN pour le soin qu'il a mis à composer les planches.

o o
o

S O M M A I R E

pages

INTRODUCTION..... 1

CHAPITRE I

Energies des défauts d'empilement et déformation plastique des halogénures d'alcalins..... 4

I. Energies des fautes d'empilement, macles, surfaces libres

I.1. Contribution Coulombienne..... 6

I.2. Contribution d'échange. Equilibre du cristal parfait..... 7

I.3. Faute d'empilement sur les plans {110}. Métastabilité.....11

I.3.1. Energie de la faute sur $(1\bar{1}0)$.....12

I.3.2. Polarisation électronique des ions au voisinage de la faute.....17

I.3.3. Polarisation ionique due à la distorsion du plan de faute.....20

a) Contribution Coulombienne.....21

b) Contribution d'échange.....22

c) Polarisation électronique γ_p des couches S_1 et S_2.....22

d) Energie totale.....24

I.3.4. Métastabilité.....25

a) Instabilité de la faute de vecteur de Burgers b/2.....25

b) Etude de la faute de vecteur de Burgers b/3.....26

b_1) Contribution Coulombienne $\gamma_c(b/3)$. 26

b_2) Contribution d'échange $\gamma_e(b/3)$.... 27

b_3) Contribution de polarisation $\gamma_p(b/3)$.....27

I.4. Faute d'empilement sur les plans {111} . Mâcles....30

I.5. Fautes sur les plans (100).....32

I.5.1. Faute $\frac{a}{4}[110](001)$.....32

I.5.2. Faute $\frac{a}{2}[100](001)$.....33

I.6. Fautes dans la structure CsCl.....35

II. Dissociation des dislocations.....38
II.1. Fautes de largeur finie.....38
II.2. Dissociation des dislocations sur les plans {110}...40
II.2.1. Dissociations obtenues avec la faute en équilibre.....40
II.2.2. Dissociations obtenues en tenant compte de l'instabilité de la faute.....42
II.3. Dissociation sur les plans {100}.....45
II.4. Dissociation sur les plans {111}.....46
III. Applications.....47
III.1. Formation de barrières sessiles.....47
III.2. Glissements déviés.....49
III.3. Clivage.....51

CHAPITRE II

Parois de macle dans les ferroélectriques. Energies de paroi dans le Titanate de Baryum.....52
I. Détermination des moments dipôlaires du Titanate de Baryum.53
II. Calcul des champs électriques produits par des réseaux périodiques de dipôles.....55
II.1. Réseau linéaire.....55
II.2. Réseau plan.....57
III. Application au calcul de l'énergie Coulombienne d'une "paroi à 180°" du Titanate de Baryum.....60
III.1. Détermination de la matrice $A_{ij}^{(1)} + A_{ij}^{(2)}$.....60
III.2. Détermination de l'énergie Coulombienne d'une paroi (100).....61
III.3. Détermination de l'énergie Coulombienne d'une paroi (hko).....64
IV. Calcul de l'énergie d'échange d'une "paroi à 180°".....67
IV.1. Evaluation des termes d'échange.....67
IV.2. Contribution à l'énergie de paroi.....68
V. Discussion.....70

CHAPITRE III

Propagation de défauts d'empilement dans les métaux écrouis...72
I. Contraintes nécessaires à la propagation d'une faute d'empilement isolée.....73

II. Interaction à courte distance avec les arbres attractifs.....77
II.1. Modèle utilisé. Etude des résultats.....78
- Cas d'une dislocation de glissement de Shockley..78
- Cas d'une dislocation de glissement parfaite.....82
II.2. Energie gagnée par recombinaison. Distance entre arbres attractifs.....83
II.3. Force de frottement dûe aux arbres attractifs.....84
III. Formation et coalescence des dipôles.....86
- Dipôles de dislocations de Shockley.....87
- Dipôles de "stair-rods".....87
- Coalescence des dipôles.....88
IV. Conditions de propagation d'une faute d'empilement.....91
- Contrainte nécessaire à la propagation des fautes 91
- Stabilité des fautes créées.....93
- Multiplication des fautes.....93

CHAPITRE IV

Formation et propagation des macles mécaniques.....95
I. Nucléation d'une macle dans un cristal parfait C.F.C.....97
II. Propagation d'une macle dans un cristal écroui.....100
III. Constitution des joints de macle.....103
III.1. Joint non relaxé.....103
III.2. Joint relaxé.....105
IV. Contraintes nécessaires à l'épaississement des lamelles maclées.....107
IV.1. Joints non relaxés.....107
IV.2. Joints relaxés.....108
V. Conclusions.....110

CONCLUSION.....112

INTRODUCTION

Certaines structures métalliques (Cu, Zn, ...) sont compactes en ce sens qu'elles peuvent être décrites comme un empilement de plans atomiques denses avec, de temps à autre, un défaut dans la succession des plans. Observés pour la première fois à l'aide des rayons X par Edward, Lipson et Wilson en 1942, ces défauts d'empilement jouent actuellement un rôle essentiel dans toute interprétation microscopique de la déformation plastique. La raison peut en être recherchée dans le fait, mis en évidence par Heidenreich et Shockley en 1948, puis par Frank en 1949 ; que les dislocations usuelles sont généralement dissociées en deux dislocations imparfaites bordant un tel défaut. L'importance de ces dissociations varie avec le métal étudié suivant l'énergie de surface du défaut, si bien que, cette énergie est devenue une donnée essentielle caractérisant le métal, au même titre que son module d'Young par exemple.

Les notions de faute d'empilement et de dislocation dissociée ont, ensuite, été étendues à des structures moins denses, covalentes comme le Silicium et à de nombreuses structures complexes à caractère ionique plus ou moins marqué, comme $CrCl_3$ par exemple, où elles ont effectivement été observées en microscopie électronique par Amelinck et Delavignette en 1961.

Les cristaux ioniques posent, du point de vue des fautes d'empilement, un double problème, théorique et expérimental. Théoriquement, la connaissance des intéractions entre les différents ions doit permettre de calculer les énergies des fautes. Il est généralement admis que ces énergies sont très élevées en raison des fortes interactions électrostatiques entre ions. En fait, aucun calcul quantitatif n'a été publié et c'est pourquoi nous avons étudié ce problème dans le premier chapitre, nous attachant principalement à comprendre s'il n'était pas possible d'attribuer le choix des plans de glissement observés dans les

halogénures d'alcalins à une dissociation des dislocations sur ces plans. Expérimentalement, les courbes contrainte-déformation du Chlorure de Sodium ressemblent aux courbes maintenant classiques des métaux cubiques à faces centrées. On sait toute l'importance prise par les fautes d'empilement pour rendre compte de ces courbes dans les métaux (barrières de Cottrell, glissements déviés, ...). Nous chercherons également dans le premier chapitre si des mécanismes analogues peuvent être imaginés pour les halogénures d'alcalins et dans quelle mesure on peut y généraliser des notions introduites pour les métaux.

Dans un deuxième chapitre, nous étudierons certains problèmes de champs électriques locaux dans des cristaux ferroélectriques. En effet le calcul des énergies de fautes d'empilement nous amènera à mettre au point quelques méthodes simples de sommation sur des réseaux de charges périodiques ; les résultats obtenus se généralisent immédiatement à des réseaux de dipôles électriques. Comme exemple d'application possible nous calculerons l'énergie d'une "paroi à 180°" dans le Titanate de Baryum. Une telle paroi peut se décrire comme une macle, le renversement de la polarisation s'y effectuant vraisemblablement sur une distance interatomique.

Sous l'action d'une contrainte appliquée suffisante, une faute d'empilement peut traverser progressivement un cristal entraînée par une dislocation imparfaite de Shockley. Ce phénomène de propagation des fautes d'empilement isolées est fréquemment observé en microscopie électronique, probablement sous l'action des contraintes thermiques locales dues au faisceau, particulièrement dans les alliages à faible énergie de faute, comme les Cuivre - Germanium par exemple. Dans certaines conditions que nous analyserons, la faute peut engendrer une macle mécanique. Les contraintes nécessaires au développement de ces fautes d'empilement et de ces macles, dans les métaux cubiques à faces centrées, ont été mesurées par traction à froid et reliées aux énergies de fautes d'empilement. Les premières expériences de ce

genre ont été réalisées en 1954 par Blewitt sur du Cuivre. L'interprétation de ces expériences est délicate du fait que les fautes d'empilement et les macles n'apparaissent que pour des contraintes élevées, en fin de déformation où l'écrouissage est considérable et la densité de dislocations introduites importante. La présence de ces dislocations complique les phénomènes de propagation des fautes et des macles sous une contrainte donnée et rend difficile une estimation de l'énergie de faute à partir de la mesure de cette contrainte. Nous étudierons ce problème dans le troisième chapitre pour une faute d'empilement isolée.

Dans un dernier chapitre, nous généraliserons les résultats obtenus pour la faute d'empilement à la propagation d'une macle dans un cristal écroui. Depuis le travail de Cottrell et Bilby en 1951 il est clair que le maclage est un mécanisme propagé à l'aide de dislocations imparfaites. Le détail de cette propagation dépend toutefois un peu de la structure cristalline dans laquelle elle a lieu. De ce point de vue les métaux cubiques à faces centrées posent un problème intéressant : le mécanisme original de Cottrell et Bilby ne s'y applique pas, d'après ces auteurs eux-mêmes, et pourtant on sait depuis les expériences de Blewitt qu'il est possible de créer des macles mécaniques dans du cuivre en le déformant à basse température. Pour cette raison nous étudierons la propagation des macles dans les métaux cubiques à faces centrées ainsi que leur nucléation.

Finalement signalons que chacun de ces chapitres a fait l'objet d'une ou plusieurs publications, nous nous y réfèrerons au fur et à mesure.

CHAPITRE I

ENERGIES DES DEFAUTS D'EMPILEMENT ET DEFORMATION PLASTIQUE DES HALOGENURES D'ALCALINS

Soumis à une contrainte mécanique, les cristaux ioniques du type NaCl se déforment généralement par glissement sur les plans $\{1\bar{1}0\}$ dans la direction $[110]$. Gilman[13] a montré que l'effet de l'anisotropie élastique sur les dislocations ne permettait pas de distinguer un système de glissement préférentiel qui correspondrait à un minimum de l'énergie élastique des dislocations pour ce système. Utilisant les calculs de Huntington[13] sur les énergies des dislocations dans NaCl, Gilman suggère que le système de glissement doit être choisi de façon à ce que l'énergie du coeur des dislocations soit minimum.

Nous proposons ici de décrire le coeur d'une dislocation en la dissociant en dislocations partielles limitant une faute d'empilement sur un plan $(1\bar{1}0)$ suivant le schéma de la figure 3. Il est généralement admis que l'existence d'un défaut d'empilement dans un solide ionique est peu probable en raison des fortes interactions électrostatiques entre ions. En fait, il est facile d'imaginer des fautes, comme celle de la figure 3, dont l'énergie est négative si on ne tient compte que des interactions Coulombiennes, si bien que contrairement aux conclusions usuelles, il semble bien que les seules interactions électrostatiques favorisent l'existence des fautes d'empilement dans une structure ionique. Du reste on peut considérer que dans l'article déjà cité de Huntington[13] les configurations obtenues sont dissociées avec une largeur de dissociation de 1,5 b.

Après avoir mis au point dans les deux premières parties des méthodes simples permettant le calcul des énergies de faute d'empilement dans un cristal ionique, nous ferons une étude systématique des fautes sur les plans atomiques les plus denses

{110} (I.3), {111} (I.4) et {100} (I.5). Nous ferons une étude plus détaillée pour les plans {110} où les dislocations sont probablement dissociées. En particulier, nous montrerons {(I.3.2) et (I.3.3)} que la polarisation électronique des ions demeure faible même au voisinage immédiat de la faute ou les entourages des ions plus proches voisins deviennent pourtant dissymétriques, la cause en est due à une dilatation locale du réseau perpendiculairement au plan de faute.

Nous avons fait une étude plus approchée pour les plans {100} et {111} pour lesquels nous n'avons pas en particulier tenu compte des relaxations possibles perpendiculairement au plan de faute.

Dans un deuxième paragraphe nous utiliserons ces énergies de fautes d'empilement pour estimer l'importance des dissociations des dislocations parfaites en dislocations partielles. Nous montrerons en particulier que les dissociations obtenues semblent suffisantes pour expliquer les plans de glissement observés.

Enfin, dans une troisième partie nous montrerons comment l'existence de dislocations dissociées dans les cristaux ioniques permet de comprendre certaines observations faites au cours de la déformation plastique de ces cristaux (glissements déviés, durcissement d'écrouissage et formation de barrières sessiles, clivage).

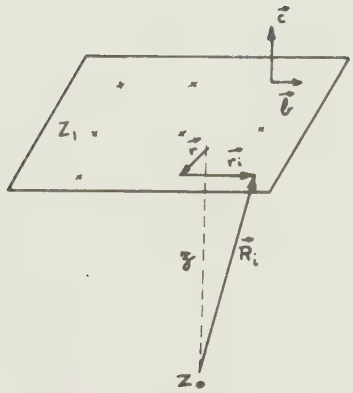


Fig. 1 - Interaction d'une charge Z_0 avec un plan de charges Z_1 périodiques.

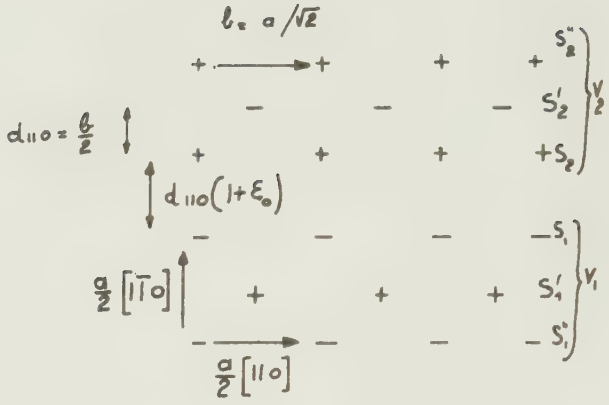


Fig. 2 - Schéma d'une faute d'empilement $\frac{a}{4}$ [110] $(1\bar{1}0)$ dans la structure Na Cl

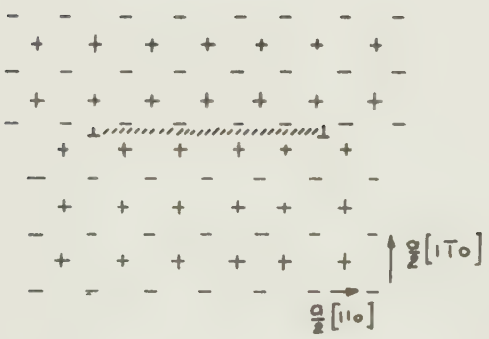


Fig. 3 - Schéma d'une dislocation coin dissociée sur un plan $(1\bar{1}0)$ dans la structure Na Cl.

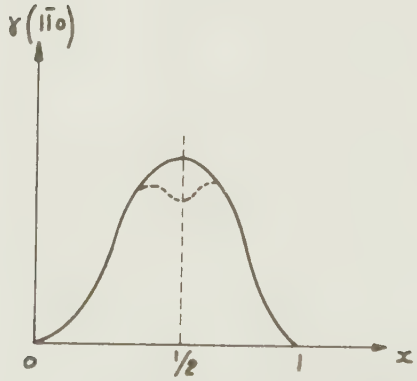


Fig. 4 - Energie d'une faute d'empilement sur un plan $(1\bar{1}0)$ de vecteur de Burgers bx dans la direction [110]. (La courbe en pointillé correspondrait à une faute d'empilement dans la structure C.F.C. métallique).

I. ENERGIES DES FAUTES D'EMPILEMENT, MACLES, SURFACES LIBRES.

Dans un cristal ionique, l'énergie d'un défaut d'empilement se compose de deux termes respectivement dus aux interactions Coulombienne et d'échange entre ions. Nous présenterons d'abord une méthode simple permettant de sommer rapidement les interactions Coulombiennes.

I.1. Contribution Coulombienne.

Nous grouperons les ions par plans parallèles au défaut d'empilement. Ce groupement permet d'obtenir des interactions entre plans exponentiellement décroissantes avec leur distance. L'introduction d'un défaut plan ne modifie donc que les interactions entre plans voisins du défaut et le calcul de son énergie devient assez simple. Cette méthode utilisée par Madelung[1] pour le calcul de l'énergie de cohésion des cristaux ioniques a permis plus récemment de déterminer les énergies de surface libre[2] des cristaux ioniques et des fautes d'empilement des métaux normaux[3]. Nous la généraliserons dans le chapitre II au calcul d'interactions dipôlaires dans les ferroélectriques.

Le changement d'énergie d'interaction de l'ion 0 de charge Z_o avec le plan de charges Z_1 périodiques, quand on déplace ce plan parallèlement à lui-même d'un vecteur $\vec{b}$ peut s'écrire (figure 1) :

$$V(\vec{R}) = Z_o Z_1 \sum_i \left\{ \frac{1}{|\vec{R}_i+\vec{b}|} - \frac{1}{|\vec{R}_i|} \right\}$$

$$= \frac{Z_o Z_1}{2\pi^2} \int dk d_2 k_T \left\{ e^{ikz} e^{i\vec{k}_T\vec{r}} (e^{i\vec{k}_T\vec{b}} - 1) \sum_i e^{i\vec{k}_T\vec{r}_i} \right\} / (k^2+k_T^2)$$

La dernière expression s'obtient simplement en explicitant la transformée de Fourier de $1/|\vec{R}_i|$. La périodicité du plan de char-

ges permet d'exprimer la somme sur les vecteurs $\vec{r}_i$ comme une somme sur les vecteurs $\vec{\lambda}$ du plan réciproque :

$$\sum_i e^{i\vec{k}_T\vec{r}_i} = \frac{(2\pi)^2}{\Omega} \sum_{\vec{\lambda}} \delta(\vec{k}_T - \vec{\lambda})$$

(Ω = surface de la maille élémentaire du réseau réel). On en déduit :

$$V(\vec{R}) = \frac{2Z_oZ_1}{\Omega} \sum_{\vec{\lambda}} e^{i\vec{\lambda}\vec{r}} (e^{i\vec{\lambda}\vec{b}} - 1) \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{e^{ikz}\, dk}{k^2 + \lambda^2}$$

soit :

$$V(\vec{R}) = \frac{2\pi}{\Omega} Z_oZ_1 \sum_{\vec{\lambda}} e^{i\vec{\lambda}\vec{r}} (e^{i\vec{\lambda}\vec{b}} - 1) \frac{e^{-\lambda z}}{\lambda} \qquad (I.1)$$

Le terme $\vec{\lambda} = 0$ est à exclure de la sommation donnant $V(\vec{R})$. Il n'intervient pas pour un déplacement parallèle au plan ; en effet, il correspond dans la série de Fourier au premier coefficient : il ne dépend que de z.

Pour un déplacement perpendiculaire au plan de z à z+c, on obtient de même :

$$V(\vec{R}) = \frac{2\pi}{\Omega} Z_oZ_1 \left[\sum e^{i\vec{\lambda}\vec{r}} (e^{-\lambda c} - 1) \frac{e^{-\lambda z}}{\lambda} - c\right] \qquad (I.2)$$

Le terme $-2\pi Z_oZ_1c/\Omega$ correspond à $\lambda = 0$ de sorte que dans la sommation $\lambda \neq 0$.

L'utilisation des formules (I.1 et 2) nous permettra de déterminer dans la troisième partie de ce chapitre la contribution Coulombienne aux énergies de divers défauts d'empilement.

I.2. Contribution d'échange. Equilibre du cristal parfait.

L'introduction d'un défaut d'empilement dans un cristal ionique peut modifier la nature et la distance des ions premiers

voisins. Cette modification se traduit par l'apparition dans l'énergie de faute d'un terme supplémentaire dû aux forces d'échange (répulsives) entre ions. Pour évaluer l'ordre de grandeur de cette contribution, nous ne tiendrons compte que des interactions entre ions premiers voisins.

L'interaction d'échange entre deux ions de signes opposés peut s'écrire[4] :

$$\lambda e^{-r/\rho} \qquad (I.3)$$

La détermination des paramètres λ et ρ est classique[5]. Soit U l'énergie du cristal par molécule, dans la structure NaCl on obtient en introduisant la constante de Madelung α :

$$U = -\frac{\alpha e^2}{r} + 6\,\lambda e^{-r/\rho}$$

Des conditions d'équilibre $\frac{\partial U}{\partial r} = 0$ et $\frac{1}{K} = V\,\frac{\partial^2 U}{\partial V^2}$ $(V = 2r^3)$, on déduit les deux paramètres λ et ρ connaissant la distance d'équilibre r et le module de compressibilité isotherme K. On obtient :

$$\frac{r}{\rho} = 2 + \frac{18r^4}{\alpha K e^2}$$

et

$$6\lambda = \frac{\alpha e^2 \rho}{r^2}\, e^{r/\rho}$$

Les valeurs obtenues pour différents halogénures d'alcalins de la structure NaCl sont rassemblées tableau I[5].

Nous montrerons dans la suite que les dislocations sont probablement dissociées sur les plans $(1\bar{1}0)$. Le calcul de l'énergie de faute correspondante nécessite la connaissance de l'énergie de cohésion du cristal parfait par unité de surface de plan $(1\bar{1}0)$. Nous montrerons ici que les paramètres λ et ρ du tableau I et l'utilisation des formules (I.1 et 2) permettent la détermination de cette énergie. Pour cela nous commencerons par étudier l'équilibre du cristal parfait vis-à-vis d'un allongement unidi-

rectionnel perpendiculaire aux plans $(1\bar{1}0)$, la distribution des ions dans ces plans restant celle de l'équilibre.

	r (10^{-8} cm)	K (10^{-12} cm^2 $dyne^{-1}$)	6λ (10^{-12} ergs)	ρ (10^{-8}cm)
LiF	2,014	1,49	2.960	0,291
NaF	2,317	2,15	6.410	0,290
NaCl	2,820	4,17	10.500	0,321
NaBr	2,989	5,02	13.300	0,328
NaI	3,237	6,64	15.800	0,345
KCl	3,147	5,73	20.500	0,326
KBr	3,298	6,75	23.000	0,336
KI	3,533	8,55	28.500	0,348

Tableau I. Détermination des paramètres d'échange

L'énergie E(z) du cristal parfait, par unité de surface de plan $(1\bar{1}0)$, s'écrit, en fonction de l'écartement $z = (1 + \varepsilon)a/2\sqrt{2}$ des plans $(1\bar{1}0)$:

$$E(z) = E_e(z) + E_c^{(1)}(z) \qquad (I.4)$$

Les contributions d'échange $E_e(z)$ et Coulombienne $E_c^{(1)}(z)$ peuvent s'écrire :

$$E_e(z) = (4\sqrt{2}/a^2)\lambda e^{-r/\rho} \qquad (I.5)$$

avec $r = (1 + (1 + \varepsilon)^2)^{1/2}\, a/2\sqrt{2}$

et $$E_c^{(1)}(z) = \frac{1}{2}\left[2\gamma_2(z)+2\gamma_1(2z)+2\gamma_2(3z)+2\gamma_1(4z)+ \ldots\right] \qquad (I.6)$$

Nous avons supposé que la distance entre ions dans chaque plan $(1\bar{1}0)$ était celle d'équilibre et que seule variait la distance $z = (1 + \varepsilon)a/2\sqrt{2}$ entre plans $(1\bar{1}0)$. $\gamma_2(z)$, $\gamma_1(2z)$, ... représentent les interactions Coulombiennes entre plans $(1\bar{1}0)$, respectivement premiers voisins, seconds voisins, ...

En utilisant la formule (I.1), on peut expliciter γ_1 et γ_2 :

$$\gamma_2(z) = -\frac{16e^2}{a^3}\left[e^{-\frac{\pi}{\sqrt{2}}(1+\varepsilon)} - \frac{2}{\sqrt{3}}e^{-\frac{\pi\sqrt{3}}{\sqrt{2}}(1+\varepsilon)} + e^{-\frac{3\pi}{\sqrt{2}}(1+\varepsilon)}\right.$$

$$\left. - \frac{2}{\sqrt{11}}e^{-\frac{\pi\sqrt{11}}{\sqrt{2}}(1+\varepsilon)} + \frac{2}{\sqrt{17}}e^{-\frac{\pi\sqrt{17}}{\sqrt{2}}(1+\varepsilon)} - \frac{2}{\sqrt{19}}e^{-\frac{\pi\sqrt{19}}{\sqrt{2}}(1+\varepsilon)} + \ldots\right]$$

$$\gamma_2(3z) = -\frac{16e^2}{a^3}e^{-\frac{3\pi}{\sqrt{2}}(1+\varepsilon)} + \ldots$$

$$\gamma_1(2z) = \frac{16e^2}{a^3}\left[e^{-\frac{2\pi}{\sqrt{2}}(1+\varepsilon)} + \frac{2}{\sqrt{3}}e^{-\frac{2\pi\sqrt{3}}{\sqrt{2}}(1+\varepsilon)} + \ldots\right]$$

$$\gamma_1(4z) = \frac{16e^2}{a^3}e^{-\frac{4\pi}{\sqrt{2}}(1+\varepsilon)} + \ldots \qquad \text{(I.7)}$$

Nous avons vérifié que l'énergie $E(z)$ donnée par (I.4) était bien minimum pour $z = a/2\sqrt{2}$ soit $\varepsilon = 0$. En fait on peut montrer que la condition $\partial E/\partial z = 0$ utilisée ici est équivalente à la condition $\partial U/\partial r = 0$ utilisée précédemment pour déterminer les paramètres λ, ρ. Nous avons négligé les plans quatrièmes voisins etc... . On peut montrer que l'approximation ainsi faite revient à prendre pour la constante de Madelung $\alpha = 1{,}7482$ (au lieu de 1,7476...).

Nous montrerons dans le paragraphe suivant que le calcul de l'énergie de faute sur $(1\bar{1}0)$ fait intervenir la contribution Coulombienne :

$$E_o^{(2)}(\varepsilon=0) = \left[\gamma_2(z) + 2\gamma_1(2z) + 3\gamma_2(3z) + 4\gamma_1(4z)+\ldots\right]_{z=\frac{a}{2\sqrt{2}}} \qquad (I.8)$$

et l'énergie d'échange $E_e(a/2\sqrt{2})$ du cristal parfait. Nous avons porté dans le tableau II les valeurs de $E_c^{(2)}(0)$ et $E_e(0)$ pour différents halogénures d'alcalins de la structure NaCl.

	LiF	NaF	NaCl	NaBr	NaI	KCl	KBr	KI
$E_c^{(2)}(z=a/2\sqrt{2})$ (ergs cm^{-2})	-3565	-2350	-1307	-1097	-861	-939	-813	-664
$E_e(z=a/2\sqrt{2})$ (ergs cm^{-2})	1674	954	483	390	298	315	270	212

Tableau II. Equilibre du cristal parfait. Energies par unité de surface de plan $(1\bar{1}0)$

I.3. Faute d'empilement sur les plans {110}. Métastabilité.

On peut imaginer un grand nombre de types de fautes d'empilement dans la structure du Chlorure de Sodium. Nous nous limiterons à l'étude des fautes sur les plans atomiques les plus denses, soit {110}, {100} et {111}. La structure se présente comme la superposition de deux réseaux cubiques à faces centrées décalés du vecteur $\frac{a}{2}[111]$. On sait que dans les métaux C.F.C., les plans de glissement sont les plans {111} parce que les dislocations sont justement dissociées dans ces plans suivant la réaction[6] :

$$\frac{a}{2}[\bar{1}01] \rightarrow \frac{a}{6}[\bar{1}\bar{1}2] + \frac{a}{6}[\bar{2}\,11] .$$

Comme la structure du NaCl est voisine on peut se demander pourquoi les plans de glissement sont les plans {110} dans ces composés ioniques. L'étude comparée des fautes sur les plans {110}, {100} et {111} nous montrera que les fautes sur {110} ont bien l'énergie la plus faible : dans les cristaux ioniques du type NaCl les dislocations sont donc probablement dissociées sur {110}.

Nous proposons[14] de dissocier les dislocations parfaites $\frac{a}{2}[110](1\bar{1}0)$ en deux dislocations partielles de vecteurs de Burgers $\frac{a}{4}[110]$ limitant une faute d'empilement sur le plan $(1\bar{1}0)$ suivant le schéma de la figure 3. Comme le montre une inspection rapide la faute ainsi introduite rapproche des ions de signes opposés et on doit s'attendre à une contribution électrostatique négative à l'énergie de faute qui doit favoriser son existence.

Avant d'étudier au paragraphe II le problème des dissociations et par conséquent les fautes de largeur finie, nous étudierons ici le cas d'une faute d'extension infinie définie par le vecteur de faute :

$$\frac{a}{4}\left[1 + \xi,\ 1 + \xi,\ \eta\right]$$

L'utilisation des paramètres ξ et η nous permettra dans une deuxième partie d'étudier la métastabilité de la faute $\frac{a}{4}[110](1\bar{1}0)$.

I.3.1. Energie de la faute sur $(1\bar{1}0)$.

Le calcul de la partie Coulombienne de l'énergie de faute de vecteur de Burgers $\frac{a}{4}[110]$ sur le plan $(1\bar{1}0)$ s'effectue facilement quand on suppose que l'introduction de la faute ne modifie pas la distance entre plans $(1\bar{1}0)$; en utilisant la formule (I.1) on obtient par unité de surface :

$$-\frac{64}{\sqrt{3}}\frac{e^2}{\varepsilon_\infty a^3}\left(e^{-\pi\sqrt{3}/\sqrt{2}} + 2e^{-\pi\sqrt{6}} + \ldots\right) \simeq -0{,}82\,\frac{e^2}{\varepsilon_\infty a^3} \qquad (I.9)$$

Nous avons introduit la constante diélectrique de haute fréquence ε_∞. Faire $\varepsilon_\infty = 1$ reviendrait à supposer que les nuages électroniques des ions demeurent rigides quand on introduit la faute d'empilement. En fait près de la faute les ions ne possèdent pas leur voisinage normal. Il s'en suit une polarisation électronique locale du réseau qui doit écranter plus ou moins les intéractions électrostatiques entre ions supposés rigides et dont nous avons tenu compte ici de façon <u>approchée</u> en introduisant ε_∞. Nous étudierons en détail cet effet de polarisation en I.3.2. On montrera en particulier que cet effet de polarisation est supprimé si on permet un écartement des plans $(1\bar{1}0)$ au voisinage de la faute.

En principe il suffit d'ajouter au terme Coulombien l'énergie d'échange pour obtenir l'énergie de faute. En fait le rapprochement des ions introduit par la faute ne va pas sans une forte augmentation de l'énergie d'échange mais nous montrerons que cette contribution est relaxée par une dilatation locale du réseau perpendiculairement au plan de faute dont il faut tenir compte. Pour cette raison il est préférable de comparer l'équilibre du cristal avec faute à l'équilibre du cristal parfait étudié en I.2.

Quand on introduit la faute de vecteur de Burgers $\frac{a}{4}[1+\xi,\ 1+\xi,\ \eta]$ sur le plan $(1\bar{1}0)$, nous supposerons que l'écartement des plans $(1\bar{1}0)$ devient égal à $(1+\varepsilon)a/2\sqrt{2}$ sur la faute elle-même et qu'il conserve sa valeur normale : $a/2\sqrt{2}$ pour les autres plans. L'énergie de faute fait alors intervenir la contribution suivante du cristal qui contient la faute :

$$E'(\varepsilon,\xi,\eta) = E'_e(\varepsilon,\xi,\eta) + E'_c(\varepsilon,\xi,\eta)$$

Les contributions d'échange E'_e et Coulombienne E'_c peuvent s'écrire :

$$E'_e(\varepsilon,\xi,\eta) = \frac{2\sqrt{2}}{a^2}\ \lambda\ \exp\left\{-\left[2\eta^2+\xi^2+(1+\varepsilon)^2\right]^{1/2}(a/2\sqrt{2}\rho)\right\} \quad (I.10)$$

et $$E'_c(\varepsilon,\xi,\eta) = \gamma'_1(z) + 2\gamma'_2(2z) + 3\gamma'_1(3z) + 4\gamma'_2(4z)+\ldots \quad (I.11)$$

avec

$$\gamma_1'(z) = -\frac{16e^2}{a^3}\Big[\cos\pi\eta\, e^{-\frac{\pi}{\sqrt{2}}(1+\varepsilon)} + \frac{2}{\sqrt{3}}\cos\pi\eta\cos\pi\xi\, e^{-\frac{\pi\sqrt{3}}{\sqrt{2}}(1+\varepsilon)}$$

$$+\frac{2}{3}\cos\pi\eta\cos 2\pi\xi e^{-\frac{3\pi}{\sqrt{2}}(1+\varepsilon)} + \frac{2}{\sqrt{19}}\cos\pi\eta\cos 3\pi\xi e^{-\frac{\pi\sqrt{19}}{\sqrt{2}}(1+\varepsilon)}$$

$$+\frac{1}{3}\cos 3\pi\eta e^{-\frac{3\pi}{\sqrt{2}}(1+\varepsilon)} + \frac{2}{\sqrt{11}}\cos 3\pi\eta\cos\pi\xi e^{-\frac{\pi\sqrt{11}}{\sqrt{2}}(1+\varepsilon)}$$

$$+\frac{2}{\sqrt{17}}\cos 3\pi\eta\cos 2\pi\xi e^{-\frac{\pi\sqrt{17}}{\sqrt{2}}(1+\varepsilon)} + \ldots\Big]$$

$$\gamma_2'(2z) = \frac{16e^2}{a^3}\Big[\cos\pi\eta e^{-\frac{2\pi}{\sqrt{2}}(1+\frac{\varepsilon}{2})} - \frac{2}{\sqrt{3}}\cos\pi\eta\cos\pi\xi\, e^{-\frac{2\pi\sqrt{3}}{\sqrt{2}}(1+\frac{\varepsilon}{2})} + \ldots\Big]$$

$$\gamma_1'(3z) = \frac{16e^2}{a^3}\cos\pi\eta e^{-\frac{3\pi}{\sqrt{2}}(1+\frac{\varepsilon}{3})}$$

$$\text{et } \gamma_2'(4z) = \frac{16e^2}{a^3}\cos\pi\eta e^{-\frac{4\pi}{\sqrt{2}}(1+\frac{\varepsilon}{4})} \qquad \text{(I.12)}$$

Nous étudierons d'abord la faute $\frac{a}{4}[110]$ ($\xi = \eta = 0$) réservant la question de sa métastabilité vis-à-vis des déplacements ξ et η pour un prochain paragraphe. En minimisant $E'(\varepsilon,0,0)$ par rapport à ε, on obtient la position d'équilibre ε_o. Nous avons porté dans le tableau III les valeurs de ε_o, $E_c'(\varepsilon_o)$ et $E_e'(\varepsilon_o)$ pour différents halogénures d'alcalins. On constate que la faute étudiée introduit une dilatation importante correspondant à une modification locale δd_{110} de la distance interéticulaire d_{110} :

$$\frac{\delta d_{110}}{d_{110}} = \varepsilon_o \simeq 0,3.$$

	ε_o	$E'_c(\varepsilon_o)$	$E'_e(\varepsilon_o)$(ergs cm^{-2})
LiF	0,287	-3114	1582
NaF	0,313	-1923	845
NaCl	0,327	-1027	409
NaBr	0,333	-854	328
NaI	0,339	-661	246
KCl	0,340	-718	260
KBr	0,346	-615	219
KI	0,345	-501	172

Tableau III. Equilibre du cristal avec faute $\frac{a}{4}[110](1\bar{1}0)$

A partir des résultats précédents, l'énergie $\gamma(1\bar{1}0)$ de la faute d'empilement sur $(1\bar{1}0)$ peut s'écrire :

$$\gamma(1\bar{1}0) = \left[E'_e(\varepsilon_o) - E_e(0)\right] + \left[E'_c(\varepsilon_o) - E_c^{(2)}(0)\right] \quad (I.13)$$

Nous avons porté dans le tableau IV les énergies finalement obtenues pour les fautes $\frac{a}{4}[110](1\bar{1}0)$. Ces énergies sont de l'ordre de $\mu b/30$ où μ est le module de cisaillement, elles nous permettront au paragraphe II d'estimer la largeur des dislocations dissociées.

	ε_∞	α^- (10^{-24} cm^3)	$\gamma(111)$	$\gamma(1\bar{1}0)$	$\gamma_s(100)$
LiF	1,92	1	595	359	-
NaF	1,74	1	395	318	266
NaCl	2,25	3,7	220	206	214
NaBr	2,62	4,8	184	181	190
NaI	2,91	7,1	145	148	-
KCl	2,13	3,7	158	166	171
KBr	2,33	4,8	138	147	157
KI	2,69	7,1	110	123	-

Tableau IV. Energie des fautes d'empilement (les effets de polarisation étant négligés) et de surfaces libres γ_s.

Dans la formule (I.9) donnant l'énergie de faute sans tenir compte de la relaxation δd_{110} de la distance interéticulaire nous utilisions une constante diélectrique ε_∞ calculant ainsi d'après (I.13) :

$$\left[E'_e(0) - E_e(0)\right] + \left[E'_c(0) - E_c^{(2)}(0)\right]/\varepsilon_\infty$$

Quand on tient compte de l'effet de relaxation on peut se demander s'il ne faut pas minimiser $E'_e(\varepsilon) + \frac{E'_c(\varepsilon)}{\varepsilon_\infty}$ et non $E'_e(\varepsilon) + E'_c(\varepsilon)$ comme nous venons de le faire. A première vue la méthode adoptée semble négliger la polarisation électronique des ions au voisinage de la faute, effet dont on tient compte de façon approchée en introduisant ε_∞ dans (I.9) et pas dans (I.13). Nous allons justifier ce choix en faisant une étude détaillée de cette polarisation.

I.3.2. Polarisation électronique des ions au voisinage de la faute.

Nous montrerons ici que la polarisation des ions situés sur la faute est forte quand on conserve la distance interéticulaire d_{110}, elle devient par contre négligeable quand on tient compte de la dilatation δd_{110} imposée par les répulsions d'échanges entre ions.

Dans la structure NaCl parfaite chaque ion est un centre de symétrie, sur un ion le champ électrique dû aux autres ions est nul et les ions ne sont pas polarisés. Quand on introduit une faute (figure 2) le champ sur un ion de la couche S_1 dû aux ions de la couche S_1' n'est plus compensé par le champ de la couche S_2. Il s'en suit une polarisation électronique des couches S_1 et S_2 que nous allons étudier. Nous supposerons que seules les couches S_1 et S_2 sont polarisées (et pas S_1', S_2', etc...). En effet on montre que la polarisation de la couche S_1 est surtout due au déplacement de la couche plus proche voisine S_2 (S_2' et S_2'' jouant un rôle négligeable). Les positions des couches S_1' et S_1 n'étant pas modifiées par la faute la polarisation de S_1' sera négligeable puisque nous montrerons que la polarisation de S_1 elle-même est négligeable. Enfin nous supposerons que seuls les ions - sont polarisés négligeant la polarisabilité des ions + devant celle des ions - .

Utilisant les méthodes développées en I.1 on peut calculer la variation E_o du champ créé par V_2 sur un ion - de S_1 quand on introduit la faute (figure 2) on obtient tous calculs faits :

$$E_o = \frac{8\pi\sqrt{2}|e|}{a^2}\Big[0{,}05691 - e^{-\frac{\pi}{\sqrt{2}}(1+\varepsilon)} - 2e^{-\frac{\pi\sqrt{3}}{\sqrt{2}}(1+\varepsilon)} - 3e^{-\frac{3\pi}{\sqrt{2}}(1+\varepsilon)}$$

$$- 2e^{-\frac{\pi\sqrt{19}}{\sqrt{2}}(1+\varepsilon)} - 2e^{-\frac{\pi\sqrt{11}}{\sqrt{2}}(1+\varepsilon)} - 2e^{-\frac{\pi\sqrt{17}}{\sqrt{2}}(1+\varepsilon)} - e^{-\frac{3\pi}{\sqrt{2}}(1+\frac{\varepsilon}{3})}$$

$$+ e^{-\pi\sqrt{2}(1+\frac{\varepsilon}{2})} - 2e^{-\pi\sqrt{6}(1+\frac{\varepsilon}{2})} + e^{-\frac{4\pi}{\sqrt{2}}(1+\frac{\varepsilon}{4})} + \ldots\Big]$$

E_o est compté positif s'il est dirigé de S_1 vers S_2 (cf. figure 2) Dans l'expression de E_o nous avons tenu compte du champ créé par les 4 premiers plans de V_2, en fait les résultats restent pratiquement inchangés si on se limite au premier plan.

E_o induit sur les ions - de S_1 un moment dipôlaire μ. Par symétrie on obtient un dipôle $(-\mu)$ sur chaque ion - de S_2. Ces dipôles produisent à leur tour les champs E_1 et E_2 sur un ion - de S_1. E_1 est dû aux autres dipôles de S_1 (champ dépolarisant), E_2 est dû aux dipôles de S_2.

En utilisant les méthodes détaillées au chapitre II, on peut écrire :

$$E_1 = -\frac{8\mu}{a^3}\left\{\sum_{l=1}^{\infty} 2\pi\sqrt{2}\sum_{n=1}^{\infty}\frac{n}{l}K_1(nl\pi\sqrt{2}) + \zeta(2)\right\} - \frac{2\mu}{a^3}\zeta(3)$$

$$E_1 = -16{,}112\ \mu/a^3$$

De même

$$E_2 = \frac{8\pi^2\mu}{a^3}\left\{\frac{\sqrt{2}e^{-\frac{\pi}{\sqrt{2}}(1+\varepsilon)}}{\left[1+e^{-\frac{\pi}{\sqrt{2}}(1+\varepsilon)}\right]^2} + 2\sqrt{2}(\sqrt{3}e^{-\frac{\pi\sqrt{3}}{\sqrt{2}}(1+\varepsilon)} + 3e^{-\frac{3\pi}{\sqrt{2}}(1+\varepsilon)}\right.$$

$$+\sqrt{19}e^{-\frac{\pi\sqrt{19}}{\sqrt{2}}(1+\varepsilon)} - \sqrt{6}e^{-\frac{\pi\sqrt{6}}{\sqrt{2}}(1+\varepsilon)} - \sqrt{12}e^{-\frac{\pi\sqrt{12}}{\sqrt{2}}(1+\varepsilon)}$$

$$\left.+\sqrt{11}e^{-\frac{\pi\sqrt{11}}{\sqrt{2}}(1+\varepsilon)} + \sqrt{17}e^{-\frac{\pi\sqrt{17}}{\sqrt{2}}(1+\varepsilon)} + \ldots - \frac{2e^{-\pi(1+\varepsilon)}}{\left[1-e^{-\pi(1+\varepsilon)}\right]^2}\right\}$$

Quelque soit la valeur de ε, $E_2 > 0$ (champ polarisant) et $E_2 < |E_1|$.

En posant $E_1 = -\xi_1 \mu/a^3$

et $E_2 = \xi_2 \mu/a^3$

le champ E (compté positivement quand il est dirigé de S_1 vers S_2) sur un ion - de S_1 peut finalement s'écrire :

$$E = E_o - \xi_1 \frac{\mu}{a^3} + \xi_2 \frac{\mu}{a^3}$$

mais $\mu = \alpha E$ en introduisant la polarisabilité électronique α de l'ion - ; on en déduit :

$$E = \frac{E_o}{1 + \frac{\alpha}{a^3}(\xi_1 - \xi_2)} \qquad (I.14)$$

L'énergie associée à cette polarisation est égale à $-\frac{\alpha E^2}{2}$ par ion polarisé soit γ_p par unité de surface de faute d'empilement avec :

$$\gamma_p = -\frac{\sqrt{2}}{a^2} \alpha E^2 \qquad (I.15)$$

γ_p dépend de $\varepsilon = \delta d/d$ par l'intermédiaire des champs E_o et ξ_2. La valeur d'équilibre ε_o de ε est obtenue à l'aide de la relation

$$\frac{\partial}{\partial \varepsilon}(E'_e(\varepsilon) + E'_c(\varepsilon) + \gamma_p(\varepsilon)) = 0 \qquad (I.16)$$

Nous avons porté dans le tableau V (2e colonne) les résultats obtenus pour LiF et NaCl. On voit que l'effet de la polarisation électronique est pratiquement négligeable : les ions au voisinage de la faute ne sont pas polarisés. Une étude du champ polarisant E_o montre en effet que ce champ est négatif pour $\varepsilon = 0$, il devient positif quand $\varepsilon \to \infty$ et il est pratiquement nul quand ε est égal au paramètre d'équilibre ε_o. Ceci justifie l'emploi d'une constante diélectrique égale à 1 dans I.13.

		sans polarisation	avec polarisation électronique	avec polarisation électronique et ionique
LiF	ε_o	0,287	0,267	0,267
	ε_1	0	0	- 0,018
	ε_2	0	0	0,013
	E'_e	1582	1744	1685
	E'_c	- 3114	- 3273	- 3273
	γ	359	349	330
NaCl	ε_o	0,327	0,323	0,323
	ε_1	0	0	- 0,018
	ε_2	0	0	0,021
	E'_e	409	420	414
	E'_c	- 1027	- 1037	- 1037
	γ	206	206	195

Tableau V. Effets de polarisation sur l'énergie de la faute d'empilement $\frac{a}{4}[110](1\bar{1}0)$.

I.3.3. Polarisation ionique due à la distorsion du plan de faute.

Jusqu'à présent nous avons supposé que les ions de part et d'autre de la faute restaient dans les plans S_1 et S_2. Nous

supposerons maintenant que les ions + et - des surfaces S_1 et S_2 peuvent sortir (ou rentrer) de V_1 et V_2 donnant ainsi un aspect ondulé à ces surfaces, les déplacements n'étant pas identiques pour les deux types d'ions. On sait que cet effet joue un rôle important pour les surfaces libres[2] , nous montrerons qu'il est assez faible pour les fautes d'empilement.

En plus du paramètre ε utilisé précédemment nous introduirons maintenant les paramètres ε_1 et ε_2 définis à partir des déplacements e_1 et e_2 des ions - et + de la surface S_1 (ou S_2) ($\varepsilon = \frac{a}{2\sqrt{2}}e$). Pour les ions de la surface S_1 (figure 2) nous compterons e_1 et e_2 positivement pour des ions - et + respectivement sortant et entrant dans le volume V_1. Nous étudierons successivement les différentes contributions à l'énergie de faute d'empilement en fonction des paramètres ε, ε_1 et ε_2.

a) Contribution Coulombienne γ_c.

A l'expression précédente $E'_c(\varepsilon)$ (relation (I.11) et suivantes) s'ajoutent maintenant les contributions suivantes dues aux déplacements e_1 et e_2 :

- modification γ_c^o des interactions Coulombiennes entre ions + et - de chaque surface S_1 et S_2. On obtient :

$$\gamma_c^o = \frac{29,458\sqrt{2}e^2(e_1+e_2)^2}{a^5}$$

- modification γ_c^1 des interactions Coulombiennes entre S_1 et V_1 d'une part et S_2 et V_2 de l'autre. En utilisant les résultats de I.1 on obtient tous calculs effectués au premier ordre en e_1 et e_2 :

$$\gamma_c^1 = \frac{32\pi e^2(e_1-e_2)}{a^4}\ 0,0684$$

- modification γ_c^2 des interactions Coulombiennes entre S_1 et S_2. Après un calcul un peu long mais facile on obtient toujours

au premier ordre en e_1 et e_2 :

$$\gamma_c^2 = \frac{32\pi e^2(e_2-e_1)}{a^4}\left[e^{-\frac{\pi}{\sqrt{2}}(1+\varepsilon)} + 2e^{-\frac{\pi\sqrt{3}}{\sqrt{2}}(1+\varepsilon)} + 3e^{-\frac{3\pi}{\sqrt{2}}(1+\varepsilon)}\right.$$

$$\left. + 2e^{-\frac{\pi\sqrt{11}}{\sqrt{2}}(1+\varepsilon)} + 2e^{-\frac{\pi\sqrt{17}}{\sqrt{2}}(1+\varepsilon)} + 2e^{-\frac{\pi\sqrt{19}}{\sqrt{2}}(1+\varepsilon)} + \ldots\right]$$

Finalement

$$\gamma_c = E_c'(\varepsilon) + \gamma_c^o(\varepsilon_1,\varepsilon_2) + \gamma_c^1(\varepsilon_1,\varepsilon_2) + \gamma_c^2(\varepsilon,\varepsilon_1,\varepsilon_2) \qquad (I.17)$$

b) Contribution d'échange γ_e.

Toujours en se limitant aux ions premiers voisins la contribution d'échange peut maintenant s'écrire :

$$\gamma_e(\varepsilon,\varepsilon_1,\varepsilon_2) = \frac{2\sqrt{2}\lambda}{a^2}\left\{2\exp - \frac{a}{2\rho}\left[\frac{1}{2} + \frac{(1-\varepsilon_2)^2}{2}\right]^{1/2}\right.$$

$$+ 2\exp - \frac{a}{2\rho}\left[\frac{1}{2} + \frac{(1+\varepsilon_1)^2}{2}\right]^{1/2} + 2\exp - \frac{a}{2\rho}\left[1 + \frac{(\varepsilon_1+\varepsilon_2)^2}{2}\right]^{1/2}$$

$$\left. + \exp - \frac{a}{2\sqrt{2}\rho}(1+\varepsilon+\varepsilon_2-\varepsilon_1) - 6\exp - \frac{a}{2\rho}\right\} \qquad (I.18)$$

$\gamma_e(\varepsilon,\varepsilon_1,\varepsilon_2)$ se réduit évidemment à $E_e'(\varepsilon)$ donné par (I.10) pour $\varepsilon_1 = \varepsilon_2 = 0$.

c) Polarisation électronique γ_p des couches S_1 et S_2.

Comme précédemment nous ne tiendrons compte que de la polarisation des ions -.

- le champ polarisant E_o déjà étudié (dû

au déplacement relatif de S_1 et S_2) est maintenant perturbé par les distorsions ε_1 et ε_2 des couches S_1 et S_2, soit E_5 la perturbation du champ qui en résulte. Après un calcul analogue aux précédents on obtient :

$$E_5 = \frac{\pi^2\sqrt{2}|e|}{a^3}\left\{-2e_1\left(e^{-\frac{\pi}{\sqrt{2}}(1+\varepsilon)} - \sqrt{2}e^{-\pi(1+\varepsilon)} + \frac{6}{\sqrt{3}}e^{-\frac{\pi\sqrt{3}}{\sqrt{2}}(1+\varepsilon)} + \ldots\right)\right.$$

$$\left. + (e_2-e_1)\left(e^{-\frac{\pi}{\sqrt{2}}(1+\varepsilon)} + \sqrt{2}e^{-\pi(1+\varepsilon)} + \frac{6}{\sqrt{3}}e^{-\frac{\pi\sqrt{3}}{\sqrt{2}}(1+\varepsilon)} + \ldots\right)\right\}$$

($E_5 > 0$ si dirigé de S_1 vers S_2 - figure 2).

- Le champ dépolarisant E_1 sur un dipôle de S_1 dû aux autres dipôles μ induits sur S_1 déjà calculé en I.3.2. :

$$E_1 = -\mathcal{E}_1\mu/a^3 \quad \text{avec} \quad \mathcal{E}_1 = 16{,}112.$$

- Le champ E_2 créé par les dipôles induits de S_2 sur un ion - de S_1 se déduit facilement du cas analogue étudié en I.3.2. en remplaçant ε par $\varepsilon - 2\varepsilon_1$.

- Le déplacement relatif des ions + et - de S_1 crée un champ E_3 sur un ion - de S_1.

$$E_3 = 29{,}458|e|(e_1+e_2)/a^3$$

- Enfin il faut tenir compte de la variation du champ créé par S_1' sur un ion - de S_1 (figure 2) au cours des déplacements ε_1 et ε_2, soit E_4 cette variation, on obtient :

$$E_4 = -16\pi^2\sqrt{2}|e|\,\frac{e_1}{a^3}\,0{,}0421813 = -3{,}33050\,\frac{|e|\varepsilon_1}{a^2}$$

Finalement le champ polarisant sur un ion - de S_1 peut s'écrire :

$$E = E_o - \xi_1 \frac{\mu}{a^3} + \xi_2 \frac{\mu}{a^3} + E_3 + E_4 + E_5$$

avec $\mu = \alpha E$. On en déduit :

$$E = \frac{E_o + E_3 + E_4 + E_5}{1 + \frac{\alpha}{a^3}(\xi_1 - \xi_2)} \qquad (I.19)$$

et une énergie de polarisation γ_p par unité de surface de faute d'empilement :

$$\gamma_p = - \frac{\sqrt{2}}{a^2} \alpha E^2 \qquad (I.20)$$

d) Energie totale.

L'énergie de faute γ est maintenant égale à :

$$\gamma = \gamma_c + \gamma_e + \gamma_p - E_e(0) - E_c^{(2)}(0) \qquad (I.21)$$

avec les valeurs $E_e(0)$ et $E_c^{(2)}(0)$ du cristal parfait données par (I.5 et 8). Les valeurs d'équilibre des paramètres ε, ε_1 et ε_2 sont obtenues à partir des conditions :

$$\frac{\partial\gamma}{\partial\varepsilon} = \frac{\partial\gamma}{\partial\varepsilon_1} = \frac{\partial\gamma}{\partial\varepsilon_2} = 0$$

Nous avons porté dans le tableau V (3ème colonne) les résultats obtenus pour LiF et NaCl. ε_1 est négatif et $\varepsilon_2 > 0$: les deux types d'ions de la surface S_1 rentrent vers le volume V_1 (figure 2) d'une petite quantité ($\varepsilon_1 \simeq \varepsilon_2 \simeq \varepsilon/10$) un résultat vraisemblablement dû aux fortes répulsions d'échange entre les couches S_1 et S_2. La polarisation reste faible, le gain d'énergie qui en résulte est le plus important pour LiF sans dépasser 10 % de la valeur obtenue sans polarisation (plans S_1 et S_2 rigides et pas de polarisation électronique).

I.3.4. Métastabilité.

Au paragraphe précédent nous avons montré que la faute d'énergie $\gamma(110)$ était métastable vis-à-vis d'un déplacement ε perpendiculaire au plan de faute puisque $\partial\gamma/\partial\varepsilon = 0$ pour une valeur ε_o correspondant à un minimum relatif de γ.

Les formules (I.12) nous permettent de calculer l'énergie de la faute de vecteur de Burgers $\frac{a}{4}[1+\xi,\ 1+\xi,\ \eta\ ](1\bar{1}0)$ pour tout ξ et η. D'après les paragraphes I.3.1 et 2 les effets de polarisation sont négligeables pour $\xi = \eta = 0$ (faute de vecteur de Burgers b/2 où b est le vecteur de Burgers des dislocations parfaites). Nous commencerons donc par étudier la faute obtenue pour les faibles valeurs de ξ et de η en négligeant les effets de polarisation. Nous étudierons ensuite la faute obtenue pour $\xi = \pm 1/3$, $\eta = 0$ (de vecteur de Burgers b/3 ou 2b/3) c'est en effet pour cette position des ions que la perte de symétrie est la plus importante et qu'on doit s'attendre à obtenir la plus forte polarisation.

a) Instabilité de la faute de vecteur de Burgers b/2.

Les formules (I.10 à 12) permettent d'écrire pour les petites valeurs de ξ et η :

$$E'_e(\varepsilon_o\xi\eta) \simeq E'_e(\varepsilon_o)\left\{1 - \frac{a}{2\sqrt{2}\rho}\,\frac{(\eta^2+\xi^2/2)}{(1+\varepsilon_o)} + \ldots\right\}$$

$$\text{et}\quad E'_c(\varepsilon_o\xi\eta) \simeq E'_c(\varepsilon_o) + \frac{8\pi^2e^2}{a^3}\left[\eta^2 e^{-\frac{\pi(1+\varepsilon_o)}{\sqrt{2}}} + \frac{2(\xi^2+\eta^2)}{\sqrt{3}}e^{-\frac{\pi\sqrt{3}}{\sqrt{2}}(1+\varepsilon_o)} + \ldots\right]$$

$$\text{Soit}\quad \frac{\partial^2(E'_e+E'_c)}{\partial\eta^2} \simeq -\frac{aE'_e(\varepsilon_o)}{\sqrt{2}\rho(1+\varepsilon_o)} - \pi^2E'_c(\varepsilon_o)$$

$$\text{et}\quad \frac{\partial^2(E'_e+E'_c)}{\partial\xi^2} \simeq -\frac{aE'_e(\varepsilon_o)}{2\sqrt{2}\rho(1+\varepsilon_o)} + \frac{32\pi^2e^2}{\sqrt{3}\,a^3}\,e^{-\frac{\pi\sqrt{3}}{\sqrt{2}}(1+\varepsilon_o)}$$

Avec les valeurs du tableau III, on peut vérifier pour NaCl et LiF par exemple que :

$$\frac{\partial^2(E'_e+E'_c)}{\partial\eta^2} > 0 \quad \text{et} \quad \frac{\partial^2(E'_e+E'_c)}{\partial\xi^2} < 0 \qquad (I.22)$$

La faute de vecteur de Burgers b/2 est stable vis-à-vis des déplacements définis par ε et η, elle est instable pour un déplacement ξ. Nous verrons au paragraphe II les conséquences de cette instabilité sur une dissociation éventuelle des dislocations.

b) Etude de la faute de vecteur de Burgers b/3.

Par raison de symétrie les vecteurs de Burgers b/3 et 2b/3 définissent la même faute d'empilement (plus généralement les vecteurs de Burgers $x < b/2$ et $b-x$ définissent la même faute). Nous étudierons cette faute en tenant compte des effets de polarisation électronique. Même dans ce cas où la perte de symétrie est importante au voisinage de la faute nous montrerons que la polarisation électronique des ions diminue l'énergie de faute d'un facteur au plus égal à 10 %. Passons en revue les différentes contributions à l'énergie de faute.

b_1) Contribution Coulombienne $\gamma_c(b/3)$.

Les formules (I.12) permettent d'écrire :

$$\gamma_c(b/3) = \gamma(d) + 2\gamma(2d) + 3\gamma(3d) + 4\gamma(4d) + \ldots \qquad (I.23)$$

avec
$$\gamma(d) = -\frac{16e^2}{a^3}\left[e^{-\frac{\pi}{\sqrt{2}}(1+\varepsilon)} + \frac{e^{-\frac{\pi\sqrt{3}}{\sqrt{2}}(1+\varepsilon)}}{\sqrt{3}} - \frac{2}{\sqrt{19}}e^{-\frac{\pi\sqrt{19}}{\sqrt{2}}(1+\varepsilon)} + \frac{e^{-\frac{\pi\sqrt{11}}{\sqrt{2}}(1+\varepsilon)}}{\sqrt{11}} - \frac{e^{-\frac{\pi\sqrt{17}}{\sqrt{2}}(1+\varepsilon)}}{\sqrt{17}} + \ldots\right]$$

$$\gamma(2d) = \frac{16e^2}{a^3}\left[e^{-\pi\sqrt{2}(1+\frac{\varepsilon}{2})} - \frac{e^{-\pi\sqrt{6}(1+\frac{\varepsilon}{2})}}{\sqrt{3}} + \ldots\right]$$

$$\gamma(3d) = -\frac{16e^2}{a^3}\, e^{-\frac{3\pi}{\sqrt{2}}(1+\frac{\varepsilon}{3})}$$

$$\gamma(4d) = \frac{16e^2}{a^3}\, e^{-\frac{4\pi}{\sqrt{2}}(1+\frac{\varepsilon}{4})}$$

b_2) Contribution d'échange $\gamma_e(b/3)$.

$$\gamma_e(b/3) \simeq \frac{2\sqrt{2}\lambda}{a^2}\exp\left\{-\frac{a}{2\sqrt{2}\rho}\left[\frac{1}{9} + (1+\varepsilon)^2\right]^{1/2}\right\} \qquad (I.24)$$

b_3) Contribution de polarisation $\gamma_p(b/3)$.

Sur un ion - de S_1 (figure 5) le champ polarisant dû au déplacement relatif de S_1 par rapport à S_2 possède maintenant une composante E_{ox} parallèlement au plan de faute en plus d'une composante normale E_{oy}. Un calcul analogue aux précédents permet d'écrire pour ces champs :

$$E_{ox} = \frac{16\pi|e|}{a^2}\left[e^{-\frac{\pi\sqrt{3}}{\sqrt{2}}(1+\varepsilon)} + \frac{2}{\sqrt{3}}e^{-\frac{3\pi}{\sqrt{2}}(1+\varepsilon)} + \frac{\sqrt{3}}{\sqrt{11}}e^{-\frac{\pi\sqrt{11}}{\sqrt{2}}(1+\varepsilon)} + \frac{2\sqrt{3}}{\sqrt{17}}e^{-\frac{\pi\sqrt{17}}{\sqrt{2}}(1+\varepsilon)} + \ldots\right]$$

$$E_{oz} = \frac{8\pi\sqrt{2}|e|}{a^2}\left[e^{-\frac{\pi}{\sqrt{2}}(1+\varepsilon)} + e^{-\frac{\pi\sqrt{3}}{\sqrt{2}}(1+\varepsilon)} + e^{-\frac{\pi\sqrt{11}}{\sqrt{2}}(1+\varepsilon)} - e^{-\frac{\pi\sqrt{17}}{\sqrt{2}}(1+\varepsilon)} - 2e^{-\frac{\pi\sqrt{19}}{\sqrt{2}}(1+\varepsilon)} + \ldots - 0{,}06844\right]$$

Ces champs induisent sur les ions - de S_1 les dipôles μ_x et μ_y (comme d'habitude nous négligeons la polarisabilité des petits ions positifs). Les dipôles μ_x de la couche S_1 créent sur un ion - de cette couche un champ polarisant :

$$E_{1x} = 13{,}540\ \mu_x/a^3$$

Par contre les dipôles μ_z(perpendiculaires à la couche) créent sur un ion - un champ dépolarisant :

$$E_{1z} = -\ 16{,}112\ \mu_z/a^3$$

Soit E''_{2x} et E''_{2z} les champs créés par les dipôles μ_x de S_2 sur un ion - de S_1 et $E^{\perp}_{2x}$ et $E^{\perp}_{2z}$ les champs créés par les dipôles μ_z de S_2. On obtient après calcul :

$$E''_{2x} \simeq 8\pi^2\ e^{-\pi(1+\varepsilon)}\ \mu_x/a^3$$

$$E''_{2z} \simeq -\ 8\pi^2\sqrt{3}\ e^{-\pi(1+\varepsilon)}\ \mu_x/a^3$$

$$E^{\perp}_{2x} \simeq -\ 8\pi^2\sqrt{3}\ e^{-\pi(1+\varepsilon)}\ {}_z/a^3$$

$$E^{\perp}_{2z} \simeq 8\pi^2\sqrt{2}\ e^{-\frac{\pi}{\sqrt{2}}(1+\varepsilon)}\ \mu_z/a^3$$

De ces quatre champs, le champ (polarisant) E_{2z} est le plus élevé, il est toujours inférieur aux champs E_1.

On peut maintenant écrire pour le champ (E_x, E_z) qui polarise un ion - de S_1 :

$$E_x = E_{ox} + 13{,}540\ \frac{\mu_x}{a^3} + 8\pi^2\ e^{-\pi(1+\varepsilon)}\frac{\mu_x}{a^3} - 8\pi^2\sqrt{3}\ e^{-\pi(1+\varepsilon)}\frac{\mu_z}{a^3}$$

$$E_z = E_{oz} - 16{,}112\ \frac{\mu_z}{a^3} - 8\pi^2\sqrt{3}\ e^{-\pi(1+\varepsilon)}\frac{\mu_x}{a^3} + 8\pi^2\sqrt{2}\ e^{-\frac{\pi}{\sqrt{2}}(1+\varepsilon)}\frac{\mu_z}{a^3}$$

Soit en introduisant la polarisabilité électronique α de l'ion -

$$\mu_x = \alpha E_x \quad \text{et} \quad \mu_z = \alpha E_z$$

$$E_x = \frac{A_{22}E_{ox} - A_{12}E_{oz}}{A_{11}A_{22} - A_{12}^2} \qquad E_z = \frac{-A_{12}E_{ox} + A_{11}E_{oz}}{A_{11}A_{22} - A_{12}^2}$$

avec $$A_{11} = 1 - 13{,}540\,\frac{\alpha}{a^3} - 8\pi^2\, e^{-\pi(1+\varepsilon)}\,\frac{\alpha}{a^3}$$

$$A_{22} = 1 + 16{,}112\,\frac{\alpha}{a^3} - 8\pi^2\sqrt{2}\, e^{-\frac{\pi}{\sqrt{2}}(1+\varepsilon)}\,\frac{\alpha}{a^3}$$

$$A_{12} = 8\pi^2\sqrt{3}\, e^{-\pi(1+\varepsilon)}\,\frac{\alpha}{a^3}$$

Finalement on en déduit une énergie de polarisation $\gamma_p(\varepsilon)$ par unité de surface :

$$\gamma_p(\varepsilon) = -\frac{\sqrt{2}}{a^2}\,\alpha\,(E_x^2 + E_y^2) \qquad \text{(I.25)}$$

	sans polarisation ($\alpha=0$) $\varepsilon_o = \delta d/d$	γ(ergs cm^{-2})	avec polarisation ($\alpha\neq 0$) $\varepsilon_o = \delta d/d$	γ(ergs cm^{-2})
LiF	0,239	288	0,217	259
NaCl	0,282	181	0,276	169

Tableau VI. Energie d'une faute de vecteur b/3.

L'énergie de faute $\gamma(b/3)$ est alors égale à :

$$\gamma(b/3) = \gamma_c(\varepsilon_o) + \gamma_e(\varepsilon_o) + \gamma_p(\varepsilon_o) - E_e(0) - E_c^{(2)}(0) \qquad \text{(I.26)}$$

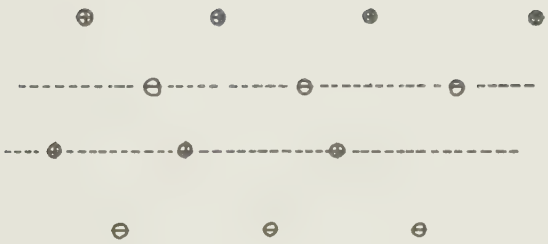


Fig. 5 - Schéma d'une faute d'empilement $\frac{b}{3}$, $(1\bar{1}0)$.

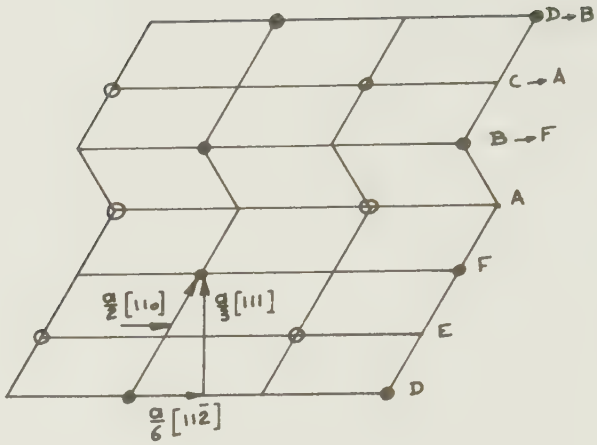


Fig. 6 - Faute intrinsèque dans Na Cl sur un plan (111). Coupe par un plan $(1\bar{1}0)$.

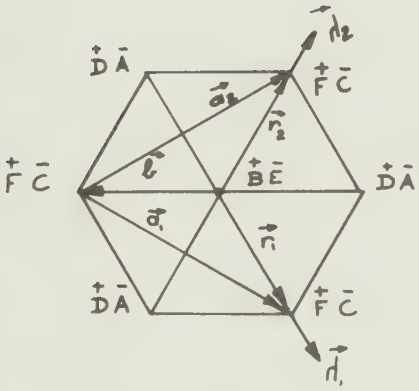


Fig. 7 - Etude des fautes d'empilement sur les plans (111) dans Na Cl ($\bar{A}$, $\overset{+}{B}$, situent les projections sur un plan (111) des ions : - de la couche A, + de la couche B, ...).

Fig. 8 - Interaction de deux rangées neutres plus proches voisines de la faute $\frac{a}{2}[110](1\bar{1}0)$

avec les valeurs de $E_e(0)$ et $E_c^{(2)}(0)$ données par (I.5 et 8) pour le cristal parfait.

La valeur ε_o d'équilibre étant donnée par la condition :

$$\frac{\partial}{\partial \varepsilon}(\gamma_c + \gamma_e + \gamma_p) = 0 \qquad (I.27)$$

Nous avons porté les valeurs numériques obtenues pour LiF et NaCl dans le tableau VI. Il ressort de la comparaison des tableaux V et VI que $\gamma(b/3) < \gamma(b/2)$ et que dans les deux cas les effets de polarisation apparaissent comme une petite correction à l'énergie de faute.
Nous avons étudié en détail la possibilité des fautes d'empilement sur les plans (110) puisque c'est sur ces plans que se produit généralement le glissement. Dans certaines conditions, il est toutefois possible d'observer d'autres plans de glissement (111) et (100), nous étudierons maintenant les possibilités de créer des fautes sur ces plans.

I.4. Faute d'empilement sur les plans {111}. Macles.

Suivant la direction [111], le cristal se présente comme un empilement de plans denses ...ABCDEFABCDEFA... (figure 6). La distribution des charges dans chaque plan est définie par les vecteurs $\vec{a}_1$ et $\vec{a}_2$ ($|\vec{a}_1| = |\vec{a}_2| = \frac{a}{\sqrt{2}}$) et le plan réciproque par $\vec{\lambda}_1$ et $\vec{\lambda}_2$ (figure 7) ($|\vec{\lambda}_i| = 4\pi\sqrt{2}/a\sqrt{3}$). Le vecteur de Burgers $\vec{b} = \frac{a}{6}[\bar{1}\bar{1}2]$ permet de définir la faute intrinsèque ...ABCDEFA/FABC... d'énergie $\gamma(111)$, purement Coulombienne la nature et la distance des premiers voisins n'étant pas modifiées.

Soit $\gamma_o(nd)$ la modification de l'énergie d'interaction entre deux plans identiques (distants de $nd = na/2\sqrt{3}$ avec $n = 6$) quand on déplace l'un d'eux de $\frac{a}{6}[\bar{1}\bar{1}2]$. On peut écrire :

$$\gamma(111) = \sum_{n=1}^{\infty} \left\{ 6n\gamma_o(6nd) + (6n-1)\gamma_o(6nd-d) - (6n-3)\gamma_o(6nd-3d) - (6n-4)\gamma_o(6nd-4d) \right\} \qquad (I.28)$$

En utilisant la formule (I.1) on obtient facilement :

$$\gamma_o(nd) \simeq - \frac{12\sqrt{6}e^2}{a^3} \exp - \frac{2\pi\sqrt{2}}{3} n \qquad (I.29)$$

en se limitant aux premiers voisins du plan réciproque. Les sommations peuvent se calculer exactement mais compte tenu de la convergence rapide le résultat exact présente peu d'intérêt et nous nous limiterons aux plans premiers voisins. On obtient ainsi :

$$\gamma(111) = 12\sqrt{6}\,\frac{e^2}{a^3}\,(2e^{-4\pi\sqrt{2}/3} + 3e^{-2\pi\sqrt{2}} - 5e^{-10\pi\sqrt{2}/3} - 6e^{-4\pi\sqrt{2}} + \ldots)$$

Chaque terme représente la contribution des plans 2ème voisins, 3ème, 5ème, etc... Finalement :

$$\gamma(111) \simeq 0{,}17\ e^2/a^3 \qquad (I.30)$$

Dans le calcul de cette énergie nous avons négligé les effets de polarisation : la position des ions premiers voisins n'est pas modifiée au voisinage de la faute et nous avons montré précédemment que les champs polarisants étaient principalement dûs au changement de la position relative des plans premiers voisins. De toute façon dans la formule (I.30) nous n'avons pas tenu compte d'une relaxation éventuelle des distances interéticulaires d_{111} sur la faute obtenant par conséquent une surestimation de l'énergie. Les valeurs ainsi obtenues ont été portées dans le tableau IV. Généralement $\gamma(111) > \gamma(110)$ (en particulier pour LiF et NaCl) et dans tous les cas $\gamma(111) > \frac{2}{3}\gamma(110)$, condition nécessaire pour que les dissociations des dislocations parfaites soient plus importantes sur (110) que sur (111) (paragraphe II.4).

Aux interactions entre plans troisièmes voisins près (précision de l'ordre de 3 %) : l'énergie $\gamma_m(111)$ de la macle ...DEFA/FED... peut s'écrire :

$$\gamma_m(111) \simeq \frac{1}{2}\gamma(111)$$

Le tableau IV permet donc d'estimer des énergies de macles relativement faibles (110 ergs cm^{-2} pour NaCl par exemple) tout à

fait comparables aux estimations des énergies de macles des métaux (20 ergs cm^{-2} pour Cu et 100 ergs cm^{-2} pour Fe ou Al).

I.5. Fautes sur les plans (100).

Nous envisagerons deux types de fautes sur les plans (100). L'une de vecteur de Burgers $\frac{a}{4}[110]$ nous permettra au chapitre II de comparer les dissociations des dislocations sur les plans {110} et {100}, la seconde de vecteur de Burgers $\frac{a}{2}[100]$ doit permettre de décrire un mécanisme de clivage à l'intersection de deux bandes de glissement orthogonales.

I.5.1. Faute $\frac{a}{4}[110](001)$.

Quand on introduit la faute l'interaction électrostatique des plans (001) situés de part et d'autre de la faute ne dépend plus de leur distance. On le voit simplement soit en regardant la structure (les interactions se compensent deux à deux), soit en utilisant l'équation (I.1) qui donne comme énergie d'interaction électrostatique entre deux plans (001) différents dont l'un est décalé du vecteur $\frac{a}{4}[110]$:

$$\frac{4\sqrt{2}}{a^3}\frac{e^2}{\varepsilon_\infty}\sum_{l,m}(e^{im\pi}-e^{il\pi})\,e^{-\sqrt{m^2+l^2}\,2\pi\sqrt{2}z/a}=0$$

indépendamment de z. Il ne reste donc entre les plans situés de part et d'autre de la faute qu'une interaction d'échange. Comme cette interaction est toujours répulsive, la faute détruit la cohésion du cristal, elle décrit en fait la création de deux surfaces libres d'énergie $\gamma_s(001)$. Pour un écartement d donné entre les plans (001) de part et d'autre de la faute le raisonnement précédent nous permet donc d'écrire :

$$\gamma_{(001)}(d) \geq 2\gamma_s(001) \qquad (I.31)$$

l'égalité n'étant vérifiée que pour $d \gtrsim a$. Nous avons porté dans le tableau IV les valeurs de $\gamma_s(001)$ calculées[2] par une méthode analogue à celle que nous utilisons ici pour les fautes.

Le raisonnement précédent est encore valable pour la faute $\frac{a}{4}[1-\varepsilon, 1+\varepsilon, 0]$. En effet pour cette faute le terme le plus important de l'énergie d'interaction Coulombienne peut s'écrire :

$$\frac{32\sqrt{2}}{a^3} \frac{e^2}{\varepsilon_\infty} \sin^2\left(\frac{\pi\varepsilon}{2}\right) e^{-2\pi\sqrt{2}z/a}$$

L'énergie d'interaction est répulsive.

I.5.2. Faute $\frac{a}{2}[100](001)$.

Dans la direction [100] le cristal se présente comme un empilement de plans ...ABABAB... . Soit $\gamma_1(z)$ l'augmentation de l'énergie Coulombienne entre deux plans (100) initialement identiques (deux plans A ou deux plans B) quand on translate l'un d'eux de $\frac{a}{2}[001]$. On vérifie que la partie Coulombienne de l'énergie de faute $\gamma_c(100)$ s'écrit :

$$\gamma_c(100) = \sum_1^\infty (-)^n \, n\gamma_1(n\tfrac{a}{2})$$

avec

$$\gamma_1(z) = -\frac{8\sqrt{2}e^2}{a^3\varepsilon_\infty} \sum_{l,m} \left[1 - e^{i\pi(l+m)}\right] \frac{e^{-((l^2+m^2)^2)^{1/2} 2\pi z/a}}{(l^2+m^2)^{1/2}}$$

On en déduit :

$$\gamma_c(100) = \frac{64\sqrt{2}e^2}{\varepsilon_\infty a^3}\left[(e^{-\pi\sqrt{2}} + \frac{2}{\sqrt{5}} e^{-\pi\sqrt{10}} + \ldots) - 2(e^{-2\pi\sqrt{2}} + \frac{2}{\sqrt{5}} e^{-2\pi\sqrt{10}} + \ldots) + \ldots\right.$$

Dans le crochet les parenthèses successives correspondent aux plans premiers voisins, seconds voisins,... . Dans chaque parenthèse, on a inclu les contributions des premiers voisins du plan

réciproque. En négligeant les interactions entre plans très voisins, on obtient avec une erreur de l'ordre de 1 % :

$$\gamma_c(100) = 1{,}54\ e^2/\varepsilon_\infty a^3 \qquad (I.32)$$

Le résultat (I.32) peut également se déduire du calcul de l'énergie Coulombienne $\sigma_c(100)$ d'une surface libre (100). L'énergie d'interaction $\gamma_o(z)$ entre deux plans de même nature dans le cristal parfait permet en effet d'écrire :

$$2\sigma_c(100) = \sum_{n=1}^{\infty} (-)^n n\gamma_o(n\tfrac{a}{2})$$

$$\text{et} \quad \gamma_1(z) = 2\gamma_o(z)/\varepsilon_\infty$$

On en déduit

$$\gamma_c(100) = 4\sigma_c(100)/\varepsilon_\infty \qquad (I.33)$$

La contribution à l'énergie de faute des termes d'échange nécessite de connaître la forme de l'interaction d'échange entre deux ions de même nature. En prenant les potentiels déterminés par Huggins et Mayer et en se limitant aux ions premiers voisins, on obtient :

$$\gamma_e(100) \approx \frac{2}{a^2}\left[\lambda_{--}\, e^{(2r_- - r)/\rho} + \lambda_{++}\, e^{(2r_+ - r)/\rho} - 2\lambda_{+-}\, e^{(r_+ + r_- - r)/\rho}\right]$$

avec $r = a/2$ et l'interaction entre 2 ions + et - mise sous la forme[4] :

$$\lambda_{+-}\, e^{-[r-(r_+ + r_-)]/\rho}$$

L'énergie totale de la faute est élevée de l'ordre de μb/10. Une valeur minimum de 233 ergs cm^{-2} est obtenue pour RbBr.
L'intérêt de cette faute est qu'elle permet comme nous le verrons au chapitre III de décrire un clivage du cristal à l'intersection de deux bandes de glissement orthogonales. En effet l'interaction électrostatique entre plans voisins de la faute distants de z est essentiellement égale à :

$$\frac{32\sqrt{2}e^2}{\varepsilon_\infty a^3} e^{-e\sqrt{2}z/a}$$

Elle est répulsive. Comme l'interaction d'échange est toujours répulsive, la faute détruit la cohésion du cristal quand elle le traverse et on obtient finalement deux surfaces libres. La situation est analogue à celle décrite en I.5.1.

I.6. Fautes dans la structure CsCl.

Jusqu'ici nous nous sommes limités à la structure du NaCl pour laquelle les observations sont les plus complètes (cf. § III).

La structure du CsCl pose un problème intéressant en rapport avec l'existence de fautes d'empilement. Les composés de ce type glissent suivant [111] ou [100] suivant qu'ils sont nettement métalliques (Cu-Zn, Ag-Mg) ou à caractère ionique plus marqué (Au-Cd, Li-Tl, CsCl, ...). Le passage du "glissement ionique" au "glissement métallique" a été attribué par Cottrell et Raschinger[7] à une chute de l'énergie de la faute d'empilement sur les plans (110) quand le caractère ionique du composé diminue. Les trois dislocations a[100], a[010] et a[001] normalement sans interactions peuvent en effet se grouper en une seule a[111] si cette réunion est suivie de la dissociation sur le plan $(1\bar{1}0)$:

$$a[111] \rightarrow \frac{a}{2}[111] + \frac{a}{2}[111]$$

Cette dissociation permet bien de gagner de l'énergie sur les trois dislocations initialement séparées ; elle entraine un glissement métallique dans la direction [111]. Il faut toutefois que la séparation des partielles $\frac{a}{2}[111]$ soit suffisante ou encore que l'énergie de faute soit inférieure à une valeur critique qu'on peut estimer être entre 200 et 250 ergs cm^{-2} [7,12].

Utilisant les méthodes précédentes, nous montrerons que l'énergie de la faute $\frac{a}{2}[111](1\bar{1}0)$ est supérieure à cette limite

pour les halogénures d'Alcalins, qui glissent suivant [100].

Suivant la direction [110] la structure CsCl se présente comme un empilement de plans ...ABABAB... . Soit γ_1 la modification d'énergie d'interaction entre deux plans de même nature quand on introduit la faute $\frac{1}{2}[111](1\bar{1}0)$ et γ_2 pour des plans de nature différente. La partie Coulombienne de l'énergie de faute peut s'écrire :

$$\gamma_c(110) = \sum_{n=0}^{\infty} (2n+1)\gamma_2(na\sqrt{2}+\frac{a}{\sqrt{2}}) + \sum_{n=1}^{\infty} 2n\gamma_1(na\sqrt{2})$$

On obtient pour γ_1 et γ_2 :

$$\gamma_1(n\frac{a}{\sqrt{2}}) = -\frac{8\sqrt{2}e^2}{\varepsilon_\infty a^3}(e^{-n\pi} + \frac{e^{-n\pi\sqrt{2}}}{\sqrt{2}} + \frac{2}{\sqrt{6}}e^{-n\pi\sqrt{6}} + e^{-3n\pi} + \ldots)$$

$$\text{et } \gamma_2(n\frac{a}{\sqrt{2}}) = \frac{8\sqrt{2}e^2}{\varepsilon_\infty a^3}(e^{-n\pi} - \frac{e^{-n\pi\sqrt{2}}}{\sqrt{2}} - \frac{2}{\sqrt{6}}e^{-n\pi\sqrt{6}} + e^{-3n\pi} + \ldots)$$

Soit :

$$\gamma_c = \frac{8\sqrt{2}e^2}{\varepsilon_\infty a^3}\Big[(e^{-\pi} - \frac{e^{-\pi\sqrt{2}}}{\sqrt{2}} - \frac{2e^{-\pi\sqrt{6}}}{\sqrt{6}} + e^{-3\pi} + \ldots)$$

$$- 2(e^{-2\pi} + \frac{e^{-2\pi\sqrt{2}}}{\sqrt{2}} + \frac{2}{\sqrt{6}}e^{-2\pi\sqrt{6}} + \ldots) + \ldots\Big]$$

et finalement :

$$\gamma_c(110) \simeq 0{,}35\ e^2/\varepsilon_\infty a^3 \qquad (I.34)$$

Enfin l'énergie d'échange peut s'écrire :

$$\gamma_e(110) = \frac{\sqrt{2}}{a^2}\Big[\lambda_{++}e^{(2r_+-r)/\rho} + \lambda_{--}e^{(2r_--r)/\rho} - 2\lambda_{+-}e^{(r_++r_--r)/\rho}\Big] \qquad (I.35)$$

en utilisant les paramètres d'échange $\lambda_\pm$, $r_\pm$, ρ déterminés par Huggins et Mayer[4] ($r = a\sqrt{3}/2$).

Pour les halogénures d'alcalins γ_e apparait faible devant γ_c qui représente donc la plus grande contribution à l'énergie de faute. Nous avons porté les valeurs obtenues dans le tableau V.

	a(Å)	ε_∞	γ_e	γ_c	$\gamma=\gamma_e+\gamma_c$ ergs cm^{-2}
CsCl	4,11	2,60	- 4	443	440
CsBr	4,29	2,78	- 4	369	370
CsI	4,56	3,03	38	281	320

Tableau VII. Energies des fautes (110) dans la structure CsCl.

L'énergie la plus faible est obtenue pour CsI ; comme il se doit elle est supérieure à l'énergie critique nécessaire au glissement ionique. L'étude des composés métalliques comme Cu-Zn sort du cadre des méthodes utilisées ici ; on peut toutefois estimer l'énergie de faute de Cu-Zn inférieure à 100 ergs cm^{-2} (observation de noeuds triples de dislocations dissociées par microscopie électronique[8]). Les composés Ag-Mg, Au-Zn et Au-Cd dont le caractère ionique est intermédiaire entre le caractère ionique de Cs-Cl et celui de Cu-Zn doivent donc avoir des énergies de fautes proches de la valeur critique ($\simeq$ 250 ergs cm^{-2}). Cottrell et Raschinger citent des évidences expérimentales montrant qu'il semble bien en être ainsi[7].

II. DISSOCIATION DES DISLOCATIONS.

Nous utiliserons les résultats précédents pour étudier les dissociations éventuelles des dislocations sur différents plans. Nous montrerons que les dissociations les plus importantes se produisent sur les plans {110} expliquant ainsi les plans de glissement observés. Dans un problème de dissociation on utilise l'énergie d'une faute de largeur finie, nous commencerons par montrer sur un cas particulier que cette énergie peut bien se déduire des calculs précédents pour lesquels la largeur de la faute était supposée infinie.

II.1. Fautes de largeur finie.

Nous verrons que les dissociations obtenues sont de l'ordre de quelques distances inter. iques. Dans l'évaluation de ces dissociations on doit se demander si l'on peut utiliser une énergie de faute calculée pour une faute infinie. Nous justifierons ici l'emploi d'une énergie de faute de largeur infinie sur le cas particulier de la dislocation coin en montrant que l'interaction entre plans voisins de la faute est principalement due aux interactions des rangées (neutres) en regard qui constituent ces plans.

D'après (I.12) l'énergie Coulombienne de la faute (110) (représentée figure 2) avant relaxation de la distance interéticulaire peut s'écrire :

$$\gamma_2'(0) \simeq -\frac{16e^2}{a^3}\, e^{-\pi/\sqrt{2}} \qquad (I.36)$$

Nous grouperons maintenant les ions par rangées (neutres) [001] (cf. figure 8). L'énergie d'interaction $V(z,r)$ d'une charge Z_o avec une rangée périodique de charges Z_1 peut se calculer[1] en utilisant les méthodes qui conduisent à (I.1), on obtient :

$$V(z,r) = \frac{4Z_oZ_1}{a} \sum_{\lambda>0} \cos \lambda z K_o(\lambda r) - \frac{2Z_1Z_o}{a} \operatorname{Log} \frac{r}{r_o} \qquad (I.37)$$

avec r la distance de la charge Z_o à la rangée, z la distance de la projection de Z_o sur la rangée à une charge Z et a la période des charges. La sommation s'effectue sur la rangée réciproque : $\lambda = n \frac{2\pi}{a}$ (n = 1,2,...).

Le terme logarithmique correspond au $\lambda = 0$ de la sommation, il apparaît seul pour une distribution continue uniforme de charges de densité linéaire Z_1/a. L'utilisation de rangées neutres fait donc disparaitre le terme logarithmique et il ne reste plus qu'une intéraction à courte distance puisque :

$$K_o(z) \simeq \sqrt{\frac{\pi}{2z}}\, e^{-z}\left(1 - \frac{1}{8z} + \frac{1}{14z^2} + \ldots\right)$$

En utilisant (I.37), on peut calculer l'énergie d'interaction Coulombienne entre rangées [001] en regard au voisinage de la faute sur $(1\bar{1}0)$ (figures 2 et 8). En se limitant aux premiers voisins des rangées réciproques, on obtient avant relaxation :

$$-\frac{16\sqrt{2}e^2}{a^3} K_o\left(\frac{\pi}{\sqrt{2}}\right) \simeq -\frac{16\ 2^{1/4}e^2}{a^3} e^{-\pi/\sqrt{2}} \qquad (I.38)$$

La comparaison des formules (I.36) et (I.38) montre que 80 % de l'interaction Coulombienne entre plans voisins de la faute est due aux interactions entre rangées en regard. D'autre part les intéractions d'échange (équation I.10) ne font intervenir que les ions premiers voisins. On voit donc que l'utilisation, dans les calculs de dissociation que nous allons exposer, d'une énergie de faute calculée pour une faute infinie est justifiée dès que la largeur des dissociations est supérieure à la "largeur" des partielles bordant la faute : $d \geqslant b$, ce que nous vérifierons être le cas.

II.2. Dissociation des dislocations sur les plans {110}.

Nous supposerons tout d'abord que la dissociation fait intervenir la faute $\frac{a}{4}[110](1\bar{1}0)$ entre les deux partielles $\frac{a}{4}[110]$. Comme nous l'avons montré en I.3.4 cette faute correspond bien à un équilibre du cristal mais cet équilibre est instable en absence de contrainte appliquée. La faute peut cependant être stabilisée par la répulsion des partielles qui la bordent. Nous étudierons cet effet dans une deuxième partie.

II.2.1. Dissociations obtenues avec la faute en équilibre.

Dans le calcul de la largeur de dissociation d, il faut tenir compte de la dilatation locale du réseau au voisinage de la faute. Cette dilatation introduit en plus des partielles $\frac{a}{4}[110]$ des dislocations d'épitaxie dont le vecteur de Burgers est perpendiculaire au plan de faute et égal à : $\frac{\varepsilon a}{2}[\bar{1}10]$. La dissociation de la dislocation parfaite de vecteur de Burgers $\frac{a}{2}[110]$ s'écrit :

$$\frac{a}{2}[110] \rightarrow \frac{a}{4}[110] + \frac{a}{4}[110] + \frac{\varepsilon a}{2}([\bar{1}10] + [1\bar{1}0])$$

La répulsion des partielles est égale à :

$$\frac{\mu(a/2\sqrt{2})^2(1 - \varepsilon^2)}{2\pi d} \qquad (I.39)$$

Le coefficient μ est relié aux constantes élastiques c_{ij}. Quand on tient compte de l'anisotropie de ces constantes on peut en utilisant les résultats de l'élasticité anisotrope[9] montrer que dans la structure NaCl pour des dislocations purement vis et purement coin il faut prendre :

$$\mu_{vis} = \left\{c_{44}(c_{11} - c_{12})/2\right\}^{1/2}$$

$$\mu_{coin} = (c_{11}+c_{12})\left\{c_{44}(c_{11}-c_{12})/c_{11}(c_{11}+c_{12}+2c_{44})\right\}^{1/2}$$

Nous avons rassemblé dans le tableau VI les valeurs des constantes c_{ij} à la température ambiante[10] et des constantes μ_{vis} et μ_{coin}. Nous y avons également porté le facteur d'anisotropie $K = (c_{11}-c_{12})/2c_{44}$ rapport des deux modules de cisaillement sur les systèmes $(1\bar{1}0)[110]$: $(\frac{c_{11}-c_{12}}{2})$ et $(100)[001]$: (c_{44}).

	c_{11}	c_{44}	c_{12}	$K=\frac{c_{11}-c_{12}}{2c_{44}}$	μ_{vis}	μ_{coin}	$(\frac{d}{b})_{vis}$	$(\frac{d}{b})_{coin}$
LiF	13,2	6,8	4,2	0,66	5,54	6,72	1,7	2
NaCl	4,86	1,27	1,28	1,41	1,50	2	1,1	1,4
NaBr	3,87	0,97	0,97	1,55	1,45	1,58	1,3	1,4
KCl	3,98	0,625	0,62	2,68	1,02	1,03	1	1
KBr	3,46	0,505	0,58	2,85	0,86	1,16	1	1,4
KI	2,67	0,42	0,43	2,66	0,69	0,93	1	1,4

Tableau VI . Valeurs des constantes élastiques, du facteur d'anisotropie K et des paramètres μ_{vis} et μ_{coin} (en 10^{11} dynes cm^{-2}). Largeurs d des dissociations vis et coin sur les plans {110} ($b = a/\sqrt{2}$)

A l'équilibre, la répulsion des partielles donnée par (I.39) doit égaler la tension superficielle de la faute $\gamma(110)$. On en déduit :

$$\frac{d}{b} \simeq \frac{\mu b(1-\varepsilon^2)}{8\pi\gamma} \qquad (I.40)$$

avec $b = a/\sqrt{2}$ le vecteur de Burgers des dislocations parfaites. Nous avons porté dans le tableau VI les largeurs des dissociations obtenues pour des dislocations vis et coin. Ces largeurs

sont de l'ordre de 1 à 2b. Ces valeurs sont à prendre comme largeurs minimum des dissociations, nous allons en effet montrer que l'instabilité de la faute étudiée (I.3.4) doit augmenter ces dissociations d'un facteur de l'ordre de 4.

II.2.2. Dissociations obtenues en tenant compte de l'instabilité de la faute.

Nous avons montré en I.3.4 que la faute était instable vis-à-vis d'un déplacement dans la direction [110]. Nous montrerons ici que cette instabilité doit augmenter la largeur des dissociations données par (I.40).

Les résultats du paragraphe I.3.4 montrent que l'énergie de la faute de vecteur de Burgers $\frac{x}{\sqrt{2}}[1,1,0]$ présente un maximum pour x = b/2 l'allure de la courbe $\gamma(x)$ étant schématisée figure 4. Nous prendrons $\gamma(x)$ sous la forme :

$$\gamma(x) = \gamma_o \sin^2 \frac{\pi x}{b} \qquad (I.41)$$

Cette forme décrit bien la valeur de γ au voisinage de x = 0 et de x = b/2 ; de toute façon, nous montrerons que les résultats obtenus dépendent peu du détail de la courbe $\gamma(x)$ et seulement de γ_o.

Au lieu de considérer comme précédemment une dissociation définie par deux dislocations partielles de vecteur de Burgers b/2, nous envisagerons maintenant une distribution continue de dislocations partielles infinitésimales[11]. La faute $\gamma(x)$ est en effet instable sous contrainte nulle et ce n'est que la répulsion des partielles qui peut provoquer une dissociation. Comme la courbe $\gamma(x)$ ne présente pas de minimum relatif en dehors de x = 0 une distribution continue de partielles ou le vecteur de Burgers total passe continuement de la valeur 0 à la valeur b semble à priori plus raisonnable que celle étudiée en II.2.1 puisqu'elle ne donne pas de rôle privilégié à une faute de x bien défini.

Nous utiliserons deux choix possibles pour la densité $\rho(x)$ des dislocations partielles : soit une densité constante sur un intervalle dont la largeur correspondra à la largeur de la dissociation, soit une dissociation en trois partielles de vecteur de Burgers b/3. Dans les deux cas nous obtiendrons des largeurs de dissociation plus fortes que celles prévues par (I.40) Soit une densité $\rho(x)$ de dislocations partielles constante sur un intervalle de largeur 2T telle que :

$$b \int_{-T}^{+T} \rho(x)dx = b$$

soit
$$\rho(x) = \begin{cases} T/2 & \text{pour} \quad |x| < T \\ 0 & \text{pour} \quad |x| > T \end{cases}$$

Nous obtiendrons la largeur 2T de la distribution, soit la largeur de la dissociation en miminisant l'énergie par rapport à T. Cette énergie est constituée :

a) de l'énergie de faute. Au point x le vecteur de Burgers b(x) total qui définit l'énergie de faute s'écrit :

$$b(x) = b \int_{-\infty}^{x} \rho(x)\, dx = \begin{cases} \dfrac{b(x + T)}{2T} & |x| < T \\ 0 \quad \text{si} & |x| > T \end{cases}$$

L'énergie de faute contenue dans l'élément dx situé au même point s'écrit donc :

$$\gamma(b(x))dx = \gamma_o \sin^2\left(\frac{\pi x}{2T} + \frac{\pi}{2}\right)dx = \gamma_o \cos^2 \frac{\pi x}{2T} dx \quad \text{si } |x| < T$$

D'où l'énergie de faute totale :

$$\gamma = \int_{-T}^{+T} \gamma_o \cos^2 \frac{\pi x}{2T} dx = \gamma_o T$$

b) de l'énergie d'interaction des dislocations partielles.
Dans l'élément dx au point x on peut considérer que l'on a

$\rho(x)dx$ dislocations de vecteur de Burgers b, elles interagissent avec les $\rho(x')dx'$ dislocations au point x', l'énergie d'interaction dI pouvant s'écrire approximativement[12] :

$$dI = -\frac{\mu b^2}{2\pi K}\rho(x)\rho(x')dxdx'\mathrm{Log}\frac{|x-x'|}{b} \quad (\text{avec } K=1-\nu \simeq 2/3)$$

Soit

$$I = -\int_{-T}^{T}\int_{-T}^{T}\frac{\mu b^2 dxdx'}{2\pi K\times 4T^2}\mathrm{Log}\,\frac{|x-x'|}{b} = -\frac{\mu b^2}{2\pi K}(\mathrm{Log}\,\frac{2T}{eb} - \frac{1}{2})$$

Nous avons négligé les interactions des dislocations perpendiculaires à la faute qui d'après (I.39) est faible devant I du fait que $\varepsilon << 1$.

c) de la self énergie des dislocations partielles.

La self énergie dS des $\rho(x)dx$ partielles de vecteur de Burgers b situées en x peut s'écrire :

$$dS = \frac{1}{2}\mu b^2\,\rho(x)dx$$

Soit $$S = \frac{1}{2}\mu b^2\int_{-T}^{T}\rho(x)dx = \frac{1}{2}\mu b^2$$

La largeur 2T de la dissociation est telle que :

$$\frac{\partial}{\partial T}(\gamma + I + S) = \frac{\partial}{\partial T}(\gamma + I) = 0$$

Soit $$2T = \frac{\mu b^2}{\pi K\gamma_o}$$

Cette largeur semble peu sensible à la forme exacte de $\gamma_o(x)$. On peut toujours écrire $2T = \frac{\mu b^2}{\alpha\pi K\gamma_o}$ avec les valeurs suivantes de α pour différentes formes de γ:

$$\gamma = \gamma_o \sin^2\frac{\pi x}{b} \qquad \alpha = 1$$

$$\gamma = \gamma_o \sin\frac{\pi x}{b} \qquad \alpha = 4/\pi \qquad \text{(I.42)}$$

$$\gamma = 4\gamma_o \frac{x}{b}(1 - \frac{x}{b}) \qquad \alpha = 4/3$$

$$\gamma = \gamma_o \qquad \alpha = 2$$

En prenant comme précédemment deux dislocations partielles de vecteur de Burgers b/2 de part et d'autre de la faute d'énergie γ_o on obtient $\alpha = 8$.

L'étude précédente montre donc que la dissociation est plus favorable dans le cas d'une faute instable que dans celui d'une faute métastable et que les largeurs des dissociations sont au moins égales à celles qui sont indiquées dans le tableau VI.

Si au lieu de prendre une distribution continue on prend trois partielles de vecteur de Burgers b/3 limitant la faute étudiée en I.3.4 d'énergie $\gamma(b/3)$ on obtient encore une largeur 2T donnée par la formule précédente (I.42) avec :

$$\alpha = 6\gamma(b/3)/\gamma(b/2)$$

Avec les valeurs indiquées dans les tableaux IV et VI, on obtient pour NaCl et LiF un coefficient $\alpha \simeq 5$ donnant ainsi une largeur de dissociation d intermédiaire pour le cas à trois partielles ($d \simeq 5b$) entre le cas à 2 partielles ($d \simeq b$) et la distribution continue ($d \simeq 8b$).

II.3. Dissociation sur les plans {100}.

Quand la dissociation :

$$\frac{a}{2}[110] \rightarrow \frac{a}{4}[110] + \frac{a}{4}[110] + \varepsilon\frac{a}{2}([001] + [00\bar{1}]) \qquad (I.43)$$

se produit sur le plan (001), l'énergie de faute $\gamma(001)$ entre les partielles est telle que (I.31) $\gamma(001) \geqslant 2\gamma_S(001)$ l'égalité ne se produisant que pour $\varepsilon \geqslant 1$. La largeur de la dissociation est

encore donnée par la relation (I.40) avec $\gamma = \gamma(001)$. On en déduit :

$$\frac{d}{b} \leqslant \frac{\mu b}{16\pi\gamma_S(001)}$$

soit :
$$\frac{d}{b}_{(100)} \leqslant \frac{d}{b}_{(110)} \frac{\gamma(110)}{2\gamma_S(001)} \qquad (I.44)$$

en utilisant les valeurs indiquées dans les tableaux IV et VIII on vérifie que dans tous les cas étudiés $(d/b)_{(100)} << 1$: les dislocations ne sont pas dissociées sur les plans (100).

II.4. Dissociations sur les plans {111}.

La faute étudiée en I.4 permet d'envisager une dissociation des dislocations parfaites sur les plans {111} suivant la réaction :

$$\frac{a}{2}[1\bar{1}0] \rightarrow \frac{a}{6}[1\bar{2}1] + \frac{a}{6}[2\bar{1}\bar{1}] \qquad (I.45)$$

La largeur d de la dissociation est telle que la répulsion des partielles $\frac{\mu\vec{b}_1\vec{b}_2}{2\pi d} = \frac{\mu b^2}{12\pi d}$ doit équilibrer la tension de faute $\gamma(111)$ soit :

$$\frac{d}{b}_{(111)} \simeq \frac{\mu b}{12\pi\gamma(111)} \qquad (I.46)$$

Pour une dislocation vis les partielles ont également un caractère vis prépondérant et d'après II.2.1 on peut prendre $\mu = \left\{c_{44}(c_{11}-c_{12})/2\right\}^{1/2}$. En comparant (I.46) à (I.40), on voit que $\left(\frac{d}{b}\right)_{111} << \left(\frac{d}{b}\right)_{110}$ du fait que $8\gamma(110) < 12\gamma(111)$ (Tableau IV).

III. APPLICATIONS.

Les composés ioniques du type NaCl glissent généralement sur les plans {110}. Nous avons montré qu'il était possible d'attribuer ce glissement à une dissociation des dislocations sur les plans {110}. Les dislocations ne sont pas dissociées sur les plans {100} parce que l'existence de fautes d'empilement sur ces plans détruirait la cohésion du cristal (I.5.1). Cette dernière conclusion ne vaut évidemment que dans les composés les plus ioniques où 90 % de l'énergie de cohésion est due aux interactions Coulombiennes. Dans les composés les moins ioniques il est sans doute possible d'introduire des fautes sur {100} : en effet les composés PbS et PbTe glissent bien sur {100} et les composés intermédiaires AgCl et AgBr glissent sur le plan de la zone <011> où la contrainte résolue est la plus forte (Gilman[13]).

L'existence des dissociations sur les plans {110} doit se faire sentir au cours de la déformation mécanique des cristaux ioniques de la structure NaCl. En particulier on peut s'attendre au cours de la déformation à la constitution de barrières sessiles et à des glissements déviés.

III.1. Formation de barrières sessiles.

Les six plans de glissement {110} de la structure NaCl peuvent former entre eux des angles de 60° ou de 90°. De nombreuses évidences expérimentales[13a] indiquent que l'intersection des bandes de glissement à 60° est beaucoup plus difficile que l'intersection des bandes à 90° (figures d'attaque biréfringence, durcissement latent, microscopie électronique sur MgO). Washburn[13a] a montré qu'on pouvait attribuer l'origine de cette dissymétrie dans l'interaction attractive suivante entre dislocations des "bandes à 60°" :

$$\frac{1}{2}\, a[110](1\bar{1}0) + \frac{1}{2}\, a[\bar{1}01](101) \rightarrow \frac{1}{2}\, a[011] \qquad (I.47)$$

La dislocation produite est à l'intersection des deux plans de glissement (101) et $(1\bar{1}0)$ soit $[11\bar{1}]$ en dehors de son plan de glissement usuel $(01\bar{1})$, elle agirait donc comme une barrière bloquant le mouvement des autres dislocations.

En fait la dislocation formée peut glisser dans le plan $(2\bar{1}1)$ jusqu'à être dans la direction [011] où elle peut rejoindre son plan de glissement usuel $(01\bar{1})$.

On voit donc que la réaction (I.47) ne peut décrire une barrière efficace que si le glissement de la dislocation $\frac{a}{2}[011]$ sur le plan $(2\bar{1}1)$ est rigoureusement impossible. Si il est vrai que le glissement macroscopique a généralement lieu sur $(01\bar{1})$, rien ne semble s'opposer à un glissement local sur $(1\bar{1}2)$. En conséquence la barrière décrite par (I.35) ne semble pas aussi efficace (pour bloquer un empilement par exemple) qu'il semblerait à priori.

Par contre, si les dislocations sont dissociées comme nous le proposons ici (II.2), les partielles $\frac{a}{4}[110]$ et $\frac{a}{4}[\bar{1}01]$ s'attirent à courte distance pour former la dislocation coin $\frac{a}{4}[011]$ à l'intersection $[11\bar{1}]$ des deux plans de glissement. La dislocation obtenue (glissile sur $(01\bar{1})$) repousse les deux autres partielles. On obtient donc une barrière sessile, généralisation aux cristaux ioniques de la barrière de Cottrell observée dans les métaux C.F.C. : la dissociation des dislocations stabilise la réaction (I.35). De telles dislocations immobiles et droites, à l'intersection des plans de glissement à 60° ont effectivement été observées par Wahburn[13a] dans MgO par microscopie électronique.

Par analogie avec ce qu'on admet pour les cristaux C.F.C., on peut penser que cette barrière doit jouer un rôle important dans l'origine du durcissement observé dans les cristaux ioniques après un stade de glissement facile. On peut en effet entourer complètement une source en formant de telles barrières. Par exemple une source qui émet des dislocations de vecteur de Burgers $\frac{a}{2}[\bar{1}01]$ sur (101) peut être bloquée d'après la réaction (I.47) le

long de $[11\bar{1}]$ par réaction avec la dislocation $\frac{a}{2}[1\bar{1}0](110)$. Elle peut aussi être bloquée le long de $[11\bar{1}]$ par réaction avec la dislocation $\frac{a}{2}[1\bar{1}0](110)$ du système secondaire "orthogonal" au précédent qui est également activé par la contrainte appliquée. On peut donc obtenir ainsi un parallèlogramme de barrières sessiles le long des directions $[11\bar{1}]$ et $[1\bar{1}\bar{1}]$ qui entoure complètement la source en bloquant son fonctionnement ultérieur.

Les courbes de déformation du Chlorure de Sodium ressemblent aux courbes de déformation des monocristaux métalliques C.F.C. et permettent de distinguer les stades I, II et III[13b]. Par analogie avec les métaux, on peut penser que la formation des barrières sessiles décrites ici doit jouer un rôle important dans la transition du stade I au stade II.

III.2. Glissements déviés.

Hesse[13b] a montré que le stade III du NaCl pouvait s'expliquer par un glissement dévié activé thermiquement des dislocations vis. L'analyse de ces déviations (des plans {110} aux plans {100}) semble tout à fait analogue à celle du glissement prismatique des métaux hexagonaux puisque nous avons montré que les dislocations de la structure NaCl ne sont pas dissociées sur {100} mais seulement sur {110} (II.2 et 3). D'autre part on observe par figure d'attaque de nombreux glissements déviés dans LiF et MgO.

Comme les dislocations vis sont dissociées dans le plan (110) il faut pour les faire passer dans le plan (100) les recombiner sur une certaine longueur AB limitée par deux "pincements" A et B. Le glissement dévié est un mécanisme activé thermiquement dont l'énergie d'activation U_c s'écrit :

$$U_c = U_1 + U_2 \qquad (I.48)$$

U_1 représente l'énergie des pincements A et B et U_2 une énergie liée à l'énergie de recombinaison sur une longueur AB. Des estimations classiques de ces deux énergies permettent en première approximation d'écrire :

$$U_1 \simeq \frac{\mu b^2 d}{32}(\mathrm{Log}\,\frac{d}{b})^{1/2} \qquad (I.49)$$

et $$U_2 = \frac{1}{2}\,X^{3/2}\,\frac{\mu}{\sigma}\,\mu b^3$$

X est relié à l'énergie de recombinaison ΔE des deux partielles $\frac{a}{4}[110]$:

$$\Delta E = \frac{\mu b^2}{8\pi}\mathrm{Log}\,\frac{d}{b_o} - \gamma d = \frac{1}{2}\mu b^2 X \qquad (d = \mu b^2/25\gamma)$$

avec $$X = \frac{1}{4\pi}\,\mathrm{Log}\,\frac{d}{eb_o} \qquad (I.50)$$

On en déduit un taux de déformation $\dot{\varepsilon}$ qui peut s'écrire :

$$\dot{\varepsilon} = \frac{\rho\nu L^2}{2X}\left(\frac{\sigma}{\mu}\right)^2 \exp\left(-\frac{U_c}{kT}\right) \qquad (I.51)$$

ρ ≃ densité des dislocations
ν ≃ fréquence de Debye
L^2 ≃ aire parcourue par les dislocations déviées.

D'après le tableau VI pour NaCl $d \simeq b$ d'où $U_1 \lesssim \mu b^3/10 \simeq 0{,}5$ eV.

Suivant la température, on en déduit en inversant la relation (I.51) :

$\sigma/\mu \simeq \exp U_1/2kT$ à basse température

$\sigma/\mu \simeq \mu b^3/kT$ à haute température

En comparant avec les valeurs de $\tau_{III}(T)$ obtenues pour NaCl entre 250° et 370°K[13b] on en déduit avec un $\tau_{III} \sim 1/T$ des

valeurs de $X \simeq 10^{-2}$ à 10^{-3} qui correspondent bien à des dissociations de l'ordre de quelques b.

Enfin, signalons que certaines observations dans NaCl[13b] indiquent une déviation du glissement de {110} à {100} en passant par un plan {111}. Ces résultats sont compatibles avec une dissociation possible des dislocations sur les plans {111}(I.4).

III.3. Clivage.

Nous avons montré au paragraphe I.5 que la faute de vecteur de Burgers $\frac{a}{2}[001]$ sur un plan (001) rompait la cohésion du cristal, les interactions Coulombiennes devenant répulsives. Une telle faute permet de décrire la nucléation d'une fissure à l'intersection de deux bandes de glissement orthogonales suivant la réaction :

$$\frac{a}{2}[101](10\bar{1}) + \frac{a}{2}[\bar{1}01](101) \rightarrow \frac{a}{2}[001](100) + \frac{a}{2}[001](100) \quad (I.52)$$

La fissure se produit sur le plan (100) quand la contrainte appliquée suffit à séparer les partielles. De telles fissures se produisent en effet à l'intersection des bandes "orthogonales"[13c].

En fait si les dislocations sont dissociées la situation est plus compliquée : les partielles $\frac{a}{4}[101]$ et $\frac{a}{4}[\bar{1}01]$ s'unissent en effet pour former la dislocation de vecteur de Burgers $\frac{a}{2}[001]$ qui repousse les deux autres partielles. Bien que les dislocations initiales n'interagissent pas leur vecteurs de Burgers étant perpendiculaires, on voit qu'on obtient encore une barrière sessile quand les dislocations sont au contact l'une de l'autre. Le clivage suivant la réaction (I.52) nécessite donc au préalable la recombinaison de cette barrière.

CHAPITRE II

PAROIS DE MACLE DANS LES FERROELECTRIQUES. ENERGIE DE PAROI DANS LE TITANATE DE BARYUM.

Nous étendrons ici les résultats du premier chapitre à des calculs d'interactions dipôlaires électriques. Nous appliquerons la méthode au calcul de l'énergie d'une "paroi à 180°" dans la phase ferroélectrique tétragonale du Titanate de Baryum, paroi qu'on peut considérer comme une macle dans la suite des plans de dipôles.

Dans une première partie, on évalue les moments dipôlaires portés par chaque ion en fonction des paramètres connus : polarisation macroscopique, déplacements ioniques et polarisabilités électroniques des différents ions. On montre que déplacements ioniques et polarisation macroscopique sont en bon accord quand les ions Titane portent une charge effective deux fois plus faible que celle qui correspondrait à un composé purement ionique ($Ba^{+2}\ Ti^{+4}\ O_3^{-2}$).

Cette détermination des moments dipôlaires élémentaires nous permettra dans une troisième partie de calculer la contribution Coulombienne à l'énergie d'une paroi entre deux domaines polarisés en sens opposés. Nous utiliserons en le justifiant un modèle simplifié de paroi où le renversement de la polarisation se fait sur une distance interatomique. Le calcul de l'énergie d'une paroi se simplifie quand on groupe les dipôles par plans parallèles à la paroi ; il se réduit à la détermination du champ électrique créé par de tels plans et décroît exponentiellement avec la distance à ces plans comme nous le montrerons dans la deuxième partie.

Dans une dernière partie nous discuterons les résultats, évaluant au préalable la contribution à l'énergie de paroi des interactions d'échange (répulsives) entre ions.

I. DETERMINATION DES MOMENTS DIPOLAIRES DU TITANATE DE BARYUM.

On sait que la détermination des moments dipôlaires élémentaires ne se déduit pas immédiatement de la polarisation macroscopique même quand on connaît les déplacements des différents ions[16]. Par exemple en supposant le Titanate de Baryum purement ionique et en utilisant les déplacements ioniques observés [17] on obtient une polarisation macroscopique égale à 17 $\mu Cb\ cm^{-2}$. Expérimentalement elle est de 26 $\mu Cb\ cm^{-2}$. La différence est due aux polarisabilités électroniques des ions.

Nous caractériserons dans la suite les ions d'une maille élémentaire par l'indice i courant de 1 à 5 : 1 pour Ti, 2 pour Ba, 3 pour O compris entre deux ions Ti dans la direction de la polarisation, 4 et 5 pour les deux autres ions Oxygène. Avec ces notations dans la phase tétragonale les déplacements ioniques par rapport aux positions symétriques s'écrivent :

$$\delta z_2 = 0$$
$$\delta z_1 = -\delta z_4 = -\delta z_5 = 0{,}06\ \mathring{A} \qquad \text{(II.1)}$$
$$\text{et} \quad \delta z_3 = -0{,}09\ \mathring{A}$$

Désignons par α_i, μ_i et F_i respectivement la polarisabilité, le moment dipôlaire ionique et le champ local sur l'ion i. On peut écrire :

$$a^3 F_i = \sum_{j=1}^{5} A_{ij}(\mu_j + \alpha_j F_j) \qquad \text{(II.2)}$$

A_{ij} est une matrice de rang 5 caractérisant les champs locaux dans la structure du Titanate et dont les éléments sont connus[18]. a^3 est le volume de la maille élémentaire. Les polarisabilités électroniques étant connues, l'équation (II.2) permet de déterminer les champs locaux F_i, le moment dipôlaire $\mu_i + \alpha_i F_i$ porté par chaque ion et finalement la polarisation macroscopique :

$$P = \sum_i \frac{(\mu_i + \alpha_i F_i)}{a^3} \qquad (II.3)$$

En supposant les liaisons purement ioniques, on obtient ainsi $P = 44\ \mu Cb\ cm^{-2}$. La différence avec la valeur observée doit venir d'un défaut du caractère ionique des liaisons. Nous avons donc supposé que la charge de l'ion Titane est égale à $Z < 4$, celle du Baryum à +2 et la charge de chaque ion Oxygène à $-(2+Z)/3$. On conserve ainsi un caractère purement ionique à la liaison Ba-O et la neutralité de la maille élémentaire. Les équations (II.2) et (II.3) permettent alors de déterminer la valeur de la charge effective Z qui donne un bon accord entre la polarisation macroscopique et les déplacements ioniques. On obtient ainsi $Z = 2$. Avec cette valeur les contributions à la polarisation macroscopique sont de 15 % pour le Titane dont 12 % ionique ; 6 % pour le Baryum (polarisation électronique) ; 44 % pour l'ion O_3 dont 12 % ionique et 35 % pour les deux ions O_4 et O_5 dont 16 % ionique. Ces valeurs sont assez différentes de celles déterminées par Slater[18] en ne tenant compte que du déplacement de l'ion Titane. Toutefois les ions Oxygènes jouent encore un rôle nettement dissymétrique et l'importance de l'ion fortement polarisable O_3 pour l'apparition de la ferroélectricité dans cette structure demeure évidente.

On peut conclure ce paragraphe en remarquant qu'il est assez naturel de trouver une charge effective $Z = 2$ sur l'ion Titane. En effet d'après Pauling[19] les différences d'électronégativité entre les éléments Ba-O d'une part et Ti-O de l'autre sont de l'ordre de 2,6 et 1,9 entraînant des caractères ioniques des liaisons correspondantes de l'ordre de 80 et 60 %.

II. CALCUL DES CHAMPS ELECTRIQUES PRODUITS PAR DES RESEAUX PERIODIQUES DE DIPOLES.

Nous établirons ici un certain nombre de résultats valables pour des distributions périodiques (linéaire et plane) de dipôles. Au paragraphe suivant nous utiliserons les formules obtenues pour évaluer l'énergie Coulombienne d'une paroi à 180° dans $BaTiO_3$.

La composante du champ suivant la direction des dipôles se déduit du potentiel créé par un réseau identique de charges ponctuelles en prenant la dérivée seconde de ce potentiel dans la direction des dipôles. C'est un résultat élémentaire d'électrostatique. Ces potentiels peuvent donc se déduire des résultats du chapitre I en utilisant les équations (I.1 et 37).

II.1. Réseau linéaire.

Soit $V_1(x_o y_o z_o)$ le potentiel créé en M_o par une rangée périodique de charges unités de période a. Le potentiel créé en M_o par une rangée équivalente à la première de dipôles $\vec{\mu}$ peut s'écrire :

$$-(\overrightarrow{\text{grad}}_{M_o} V_1).\vec{\mu}$$

Avec les notations de la figure 9a on obtient en utilisant (I.37):

$$V_1(M_o) = \frac{4}{a}\sum_{\lambda>0} \cos\lambda z_o K_o\left[\lambda\left\{(\xi-x_o)^2+(\eta-y_o)^2\right\}^{1/2}\right] - \frac{2}{a}\text{Log}\,\frac{\left\{(\xi-\eta_o)^2+(\eta-y_o)^2\right\}^{1/2}}{r_o} \qquad \text{(II.4)}$$

On en déduit le champ électrique $E^1(M_o)$ en M_o créé par la rangée périodique de dipôles $\vec{\mu}$ (α,β,γ étant les cosinus directeurs des dipôles) représentée figure 9. On obtient :

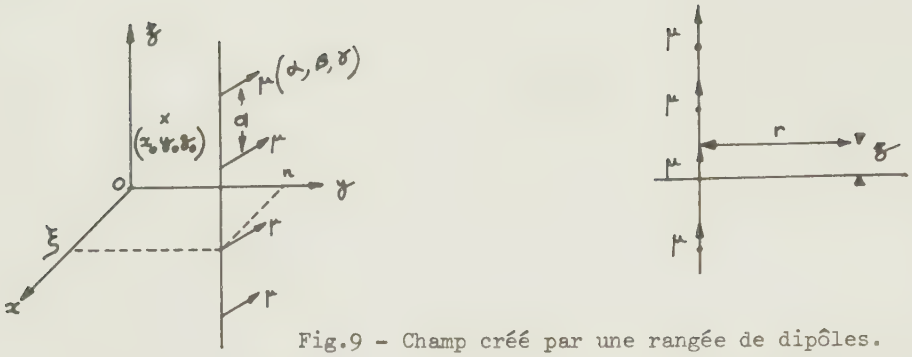


Fig.9 - Champ créé par une rangée de dipôles.

(a) d'orientation arbitraire (b) parallèles à la rangée.

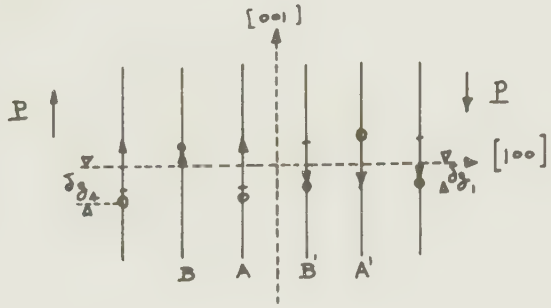
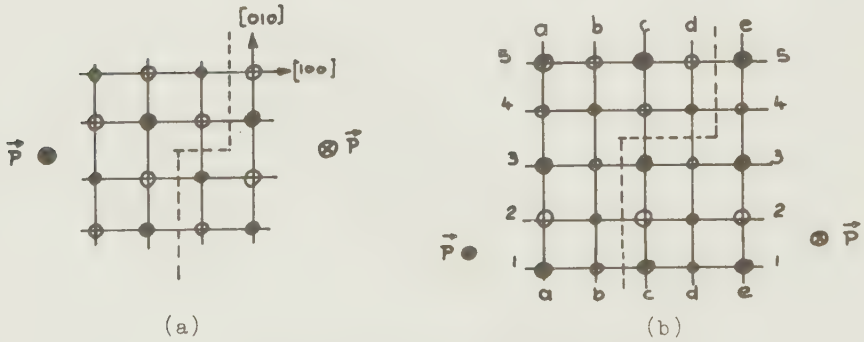


Fig. 10 - Modèle de paroi à 180° dans Ba Ti O_3.



(a) (b)

Fig. 11 - Marches sur une paroi (100)

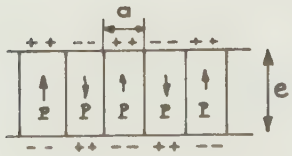


Fig. 12 - Décomposition du cristal en "domaines c".

$$- \frac{a}{4\mu} E_x^1(x_o y_o z_o) = - \sum_{\lambda>0} \lambda^2 \cos\lambda z_o K_o''\left[\lambda\left\{(\xi-x_o)^2+(\eta-y_o)^2\right\}^{1/2}\right] \times \frac{\left\{\alpha(\xi-x_o)+\beta(\eta-y_o)\right\}(\xi-x_o)}{\left[(\xi-x_o)^2+(\eta-y_o)^2\right]}$$

$$+ \sum_{\lambda>0} \lambda\cos\lambda z_o K_o'\left[\lambda\left\{(\xi-x_o)^2+(\eta-y_o)^2\right\}^{1/2}\right]\left\{\frac{-\alpha}{\left\{(\xi-x_o)^2+(\eta-y_o)^2\right\}^{1/2}} + \frac{(\xi-x_o)\left[\alpha(\xi-x_o)+\beta(\eta-y_o)\right]}{\left\{(\xi-x_o)^2+(\eta-y_o)^2\right\}^{3/2}}\right\}$$

$$- \sum_{\lambda>0} \gamma\lambda^2 \sin\lambda z_o \frac{(\xi-x_o)}{\left\{(\xi-x_o)^2+(\eta-y_o)^2\right\}^{1/2}} K_o'\left[\lambda\left\{(\xi-x_o)^2+(\eta-y_o)^2\right\}^{1/2}\right]$$

$$- \frac{1}{2}\left[\frac{-\alpha\left\{(\xi-x_o)^2+(\eta-y_o)^2\right\}+\left\{\alpha(\xi-x_o)+\beta(\eta-y_o)\right\}2(\xi-x_o)}{\left[(\xi-x_o)^2+(\eta-y_o)^2\right]^2}\right]$$

La composante E_y^1 se déduit de la précédente par permutation circulaire et :

$$- \frac{a}{4\mu} E_z^1(x_o y_o z_o) = - \sum_{\lambda>0} \lambda^2 \sin\lambda z_o K_o'\left[\lambda\left\{(\xi-x_o)^2+(\eta-y_o)^2\right\}^{1/2}\right] \times \frac{\left\{\alpha(\xi-x_o)+\beta(\eta-y_o)\right\}}{\left\{(\xi-x_o)^2+(\eta-y_o)^2\right\}^{1/2}}$$

$$+ \sum_{\lambda>0} \gamma\lambda^2 \cos\lambda z_o K_o\left[\lambda\left\{(\xi-x_o)^2+(\eta-y_o)^2\right\}^{1/2}\right] \qquad \text{(II.5)}$$

Les formules précédentes se simplifient pour $M_o = 0$ et $\alpha = \beta = 0$ on obtient alors simplement (cf. figure 9b)

$$E_x^1(z,r) = E_y^1(z,r) = 0$$

$$E_z^1(z,r) = - \frac{4\mu}{a} \sum_{\lambda>0} \lambda^2 \cos\lambda z K_o(\lambda r) \qquad \text{(II.6)}$$

La somme ($\lambda = n\frac{2\pi}{a}$ avec $n = 1,2,\ldots$) converge rapidement, il suffit en pratique de se limiter aux premiers voisins de la rangée réciproque. Les formules (II.5 et 6) ne sont pas valables pour un point de la rangée ($r = 0$). Le calcul direct du champ est alors très simple. Ainsi sur un des dipôles on obtient le champ dû aux autres (pour $\alpha = \beta = 0$) :

$$E_z^1(00) = \frac{4\mu}{a^3}\,\zeta(3) = 4{,}808\ \mu/a^3 \qquad \text{(II.7)}$$

De même le champ entre deux dipôles peut s'écrire :

$$E_z^1(\tfrac{a}{2}\ 0) = \frac{32\mu}{a^3}\,\frac{7}{8}\,\zeta(3) = 33{,}664\ \mu/a^3 \qquad \text{(II.8)}$$

II.2. Réseau plan.

Soit un réseau périodique plan de charges ponctuelles unité. Nous avons vu dans le premier chapitre que ce plan de charges crée au point $M(\vec{r},z)$ le potentiel $V_2(\vec{r},z)$:

$$V_2(\vec{r},z) = \frac{2\pi}{\Omega}\sum_{\lambda}{}' e^{i\vec{\lambda}\vec{r}}\,\frac{e^{-\lambda z}}{\lambda} - \frac{2\pi}{\Omega}(z - z_o) \qquad \text{(II.9)}$$

$M(\vec{r},z)$ est défini par sa distance z au plan et $\vec{r}$ joint la projection de M sur le plan à la charge la plus proche ; Ω est la surface de la maille élémentaire du réseau de charges. La sommation s'effectue sur tous les points λ du plan réciproque, le terme $\lambda = 0$ étant omis. On retrouve ce terme dans la deuxième partie du second membre avec une constante arbitraire z_o : il représente en fait le potentiel d'une distribution uniforme de charges de densité superficielle $1/\Omega$.

On déduit de (II.9) le champ réé par un réseau périodique plan de dipôles par la même méthode que pour le réseau linéaire. Par exemple un réseau carré de dipôles situés dans le plan et

dirigés suivant y crée au point (xyz) (l'origine étant prise sur un dipôle) un champ électrique dont la composante suivant y s'écrit :

$$E_y^2(xyz) = -8\pi^2 \frac{\mu}{a^3} \sum_{l,m>0} m^2 \cos\left[2\pi(lx+my)/a\right] \frac{e^{-2\pi\sqrt{l^2+m^2}\, z/a}}{\sqrt{l^2+m^2}} \qquad \text{(II.10)}$$

L'exponentielle assure une convergence rapide et on peut se limiter aux premiers voisins du plan réciproque. Le champ obtenu n'est valable que pour un point M hors du plan (z>0). Pour un point du plan, il faut classer les dipôles en rangées et utiliser les résultats du paragraphe précédent.

Avant d'appliquer les formules (II.5 et 10) au calcul de l'énergie d'une paroi, on peut remarquer qu'elles permettent de retrouver simplement les différentes contributions au champ de Lorentz classique : $\frac{4\pi}{3}\mu/a^3$; quand on groupe les dipôles d'un réseau cubique simple par plans (001). La rangée du dipôle où on calcule le champ local donne une contribution 4,808 μ/a^3, les autres rangées du même plan -0,291 μ/a^3 (en se limitant aux deux rangées plus proches voisines), les autres plans -0,326 μ/a^3 (en se limitant aux deux plans plus proches voisins). Ces résultats montrent :

- les dipôles sont surtout couplés entre eux dans une même rangée, le couplage est faible d'une rangée à l'autre. Ce résultat intéresse les problèmes d'états polarisés (ferro ou antiferroélectriques), de renversement de la polarisation sous l'action d'un champ appliqué et de la persistance éventuelle de chaînes polarisées dans l'état paraélectrique[16] (ordre local anisotrope).

- Dans un réseau cubique simple l'état polarisé est plus stable que l'état non polarisé mais l'état antiferroélectrique est plus stable que l'état ferroélectrique. Par exemple dans l'état ferroélectrique l'énergie d'une paroi à 180° où le renverse-

ment de la polarisation se fait sur une distance interatomique vaut $-0,326\ aP^2$ ($P = \mu/a^3$) par unité de surface de paroi : l'état ferroélectrique d'un réseau cubique simple est instable quand on se limite aux interactions Coulombienne, un résultat du reste évident quand on regarde le champ créé par un dipôle isolé.

- Pour un réseau cubique simple quand on passe à un état polarisé, on gagne une énergie $\alpha\mu^2/a^3$ par ion. Pour un état ferroélectrique $\alpha = 2,096\ (2\pi\mu P/3)$. Pour un état antiferroélectrique $\alpha = 2,422$ ou $2,678$ suivant que les plans successifs ou les rangées plus proches voisines sont polarisés en sens inverse. C'est la dernière configuration qui est la plus stable.

On peut étendre ces considérations à d'autres structures (C.C., C.F.C., etc...). Nous étudierons ici le cas du Titanate de Baryum.

III. APPLICATION AU CALCUL DE L'ENERGIE COULOMBIENNE D'UNE "PAROI A 180°" DU TITANATE DE BARYUM.

Nous commencerons par écrire les coefficients A_{ij} définis par (II.2) sous la forme :

$$A_{ij} = A_{ij}^{(1)} + A_{ij}^{(2)} \qquad \text{(II.11)}$$

On groupe ainsi les dipôles par plans (100) parallèles à l'axe [001] de la polarisation. $A_{ij}^{(1)}\mu_j$ représente la contribution au champ local sur l'ion i des moments dipôlaires portés par les ions j situés dans le même plan que l'ion i. $A_{ij}^{(2)}\mu_j$ représente la contribution des ions j situés dans les autres plans (en pratique nous montrerons qu'on peut se limiter aux plans premiers et seconds voisins). Cette décomposition nous permettra d'évaluer très simplement la partie Coulombienne de l'énergie d'une paroi (100). Nous l'étendrons à l'étude d'une paroi à 180° d'orientation quelconque par rapport à l'axe [100].

III.1. Détermination de la matrice $A_{ij}^{(1)} + A_{ij}^{(2)}$

Sur le calcul de $A_{12}^{(2)}$ résumons les approximations utilisées. D'après (II.10) on peut écrire le champ sur l'ion Titane, dû aux dipôles portés par les ions Ba situés dans les deux plans (100) premiers voisins :

$$F_{12} = -16\pi^2 \frac{\mu_2}{a^3} \sum_{m>0} \cos\pi(1+m) \frac{m^2}{\sqrt{1^2+m^2}} e^{-\pi\sqrt{1^2+m^2}}$$

Il suffit alors de pousser la sommation sur les 1 et m tels que $\sqrt{1^2+m^2} \leq 3$, c'est-à-dire d'inclure les 20 premiers voisins du plan réciproque. Au dela il faudrait également faire intervenir les ions Ba dans les plans seconds voisins. On obtient :

$$A_{12}^{(2)} = 4,22$$

avec une précision de l'ordre de 1 %. Nous avons supposé le réseau cubique. Quand on tient compte de la tétragonalité du Titanate ($\frac{c}{a}$ = 1,011), on obtient $A_{12}^{(2)}$ = 4,24. Dans la mesure où on néglige les effets des plans troisièmes voisins sur les champs locaux, on peut donc également négliger la tétragonalité : une approximation du même ordre.

Des approximations analogues sur les autres coefficients permettent finalement d'écrire pour la matrice symétrique A_{ij} :

$$(A_{ij}) = \begin{Bmatrix} 4{,}52-0{,}32 & 4{,}22 & 33{,}95+0{,}24 & -10{,}76 & 10{,}51-0{,}261 \\ & 4{,}52-0{,}32 & -4{,}47 & 8{,}26+0{,}261 & 8{,}42 \\ & & 4{,}52-0{,}32 & 8{,}42 & 8{,}26+0{,}261 \\ & & & 4{,}52-0{,}32 & -4{,}47 \\ & & & & 4{,}52-0{,}32 \end{Bmatrix} \quad \text{(III.1)}$$

Chaque terme est la somme des deux termes $A_{ij}^{(1)}$ et $A_{ij}^{(2)}$ dans l'ordre. Quand il n'y a qu'un seul terme $A_{ij}^{(1)}$ = 0. Une précision supérieure ferait intervenir les plans suivants.

III.2. Détermination de l'énergie Coulombienne d'une paroi (100).

Dans un ferromagnétique l'énergie d'anisotropie est faible devant l'énergie d'échange ; les parois des domaines sont donc assez épaisses (≈ 1000 Å), avec des énergies assez faibles (≈ 1 erg cm^{-2}). Dans un ferroélectrique la situation est inversée : le couplage entre dipôles de plans voisins est faible devant le couplage des dipôles d'un même plan ; les parois doivent donc être assez "étroites", avec des énergies plus élevées. C'est ce que confirme une analyse[20] en termes de variables macroscopiques qui minimise l'énergie libre de la paroi. Malheureusement les largeurs de l'ordre d'une distance interatomique ainsi obtenues mettent en cause le principe de cette méthode. Nous avons donc repris le calcul de l'énergie d'une paroi en supposant à

priori que le renversement de la polarisation se faisait sur une distance interatomique. Des estimations de ce genre ont été faites il y a longtemps[21] alors que les déplacements des ions n'étaient pas connus dans la phase ferroélectrique tétragonale. On supposait alors que la polarisation était due aux déplacements des seuls ions Titane. Nous montrerons que le déplacement des autres ions modifie sérieusement les résultats.

Le modèle utilisé est schématisé figure 10. Le Titanate peut être considéré comme un empilement ...ABAB... de plans (100). Les plans A et B contiennent respectivement les ions Ba-O et $Ti-O_2$ de la maille élémentaire. L'introduction d'une paroi d'épaisseur minimum crée la macle ...ABAB'A'... les lettres primées et non primées caractérisant des plans polarisés en sens inverse. L'état de polarisation de chaque plan est supposé être celui du cristal parfait (une approximation justifiée par le fait que l'état de polarisation d'un plan dépend peu de l'état des plans voisins). La partie dipôlaire de l'énergie de paroi peut alors s'écrire :

$$\gamma_d = \left[\delta E(AB') + \delta E(AA') + \delta E(BB')\right]/\varepsilon_\infty \qquad \text{(II.12)}$$

en négligeant les interactions entre plans troisièmes voisins comme nous l'avons justifié en III.1.

$\delta E(AB')$ représente la modification d'énergie par unité de surface entre les plans A et B quand on renverse la polarisation de B (figure 10).

Au voisinage immédiat de la paroi, l'entourage des ions n'est pas normal. Ce changement de symétrie par rapport au cristal sans paroi se traduit par une polarisation électronique locale supplémentaire de la paroi. Cette polarisation doit écranter plus ou moins les interactions dipôlaires. C'est de cet effet dont nous avons rendu compte en introduisant la constante diélectrique ε_∞(= 5,76).

Mise sous la forme (II.12), l'énergie de la paroi ne

dépend pas de sa position (la polarisation se renversant à partir d'un plan A ou d'un plan B, cf. figure 10). Avec les notations précédentes, on obtient :

$$\delta E(AB') = \frac{1}{a^5}\left[\mu_2(A_{12}^{(2)}\mu_1 + A_{23}^{(2)}\mu_3 + A_{25}^{(2)}\mu_5)+\mu_4(A_{14}^{(2)}\mu_1+A_{34}^{(2)}\mu_3+A_{45}^{(2)}\mu_5)\right]$$

$$\delta E(AA') = \frac{1}{a^5}\left[\mu_2(A_{22}^{(2)}\mu_2 + A_{24}^{(2)}\mu_4) + \mu_4(A_{24}^{(2)}\mu_2 + A_{44}^{(2)}\mu_4)\right]$$

$$\delta E(BB') = \frac{1}{a^5}\left[\mu_1(A_{11}^{(2)}\mu_1 + A_{13}^{(2)}\mu_3 + A_{15}^{(2)}\mu_5) + \right. \qquad \text{(II.13)}$$

$$\left. + \mu_3(A_{13}^{(2)}\mu_1 + A_{33}^{(2)}\mu_3 + A_{35}^{(2)}\mu_5) + \mu_5(A_{15}^{(2)}\mu_1+A_{35}^{(2)}\mu_3+A_{55}^{(2)}\mu_5)\right]$$

La contribution prépondérante à γ_d vient de $\delta E(AB')$ que l'on peut considérer comme la somme de deux termes :

$$\delta E(AB') = \delta E^+(AB') + \delta E^-(AB')$$

avec $$\delta E^+(AB') = \frac{1}{a^5}\left[\mu_2(A_{12}^{(2)}\mu_1 + A_{25}^{(2)}\mu_5) + A_{34}^{(2)}\mu_3\mu_4\right] \qquad \text{(II.14)}$$

$$\delta E^-(AB') = \frac{1}{a^5}\left[A_{23}^{(2)}\mu_2\mu_3 + \mu_4(A_{14}^{(2)}\mu_1 + A_{45}^{(2)}\mu_5)\right]$$

Les coefficients $A_{ij}^{(2)}$ qui interviennent dans δE^+ et δE^- sont respectivement positifs et négatifs. δE^+ favorise donc un état ferroélectrique et δE^- un état antiferroélectrique. Ce résultat se comprend simplement en remarquant qu'un dipôle isolé sépare l'espace en deux régions limitées par un cône d'axe [001] dont le sommet est sur le dipôle et qui passe par la direction [111]. A l'intérieur du cône la composante du champ créé par le dipôle est parallèle au dipôle ; elle est de signe opposé à l'extérieur. On vérifie facilement que les interactions dipôlaires qui déterminent δE^+ et δE^- rentrent dans l'une ou l'autre de ces deux régions.

En utilisant les moments dipôlaires déterminés dans II.1, on obtient les contributions suivantes :

$$\delta E(AB') = 24,4\ 10^{-2}\ a\ P^2$$

$$\delta E(AA') = -51.10^{-4}\ a\ P^2$$

$$\delta E(BB') = -101.10^{-4}\ a\ P^2$$

On en déduit

$$\gamma_d = 0,229\ a\ P^2/\varepsilon_\infty \qquad \text{(II.15)}$$

Soit avec $a = 4\ \mathring{A}$, $P = 26\ \mu\ Cb\ cm^{-2}$ et $\varepsilon_\infty = 5,76$

$$\gamma_d = 9,7\ ergs\ cm^{-2}$$

En plus de la modification des interactions dipôlaires conduisant à γ_d, l'introduction d'une paroi modifie localement l'interaction d'échange (répulsive) en modifiant les distances entre ions. La contribution γ_e correspondante à l'énergie de paroi sera évaluée au paragraphe suivant. Auparavant nous généraliserons les résultats précédents à une paroi (hko).

III.3. Détermination de l'énergie Coulombienne d'une paroi (hko).

Soit (hko) une paroi entre deux domaines polarisés en sens inverse dans la direction [001]. On peut analyser une telle paroi en marches élémentaires de hauteur d sur une paroi (100). Soit λ l'énergie par unité de longueur dans la direction [001] d'une telle marche. Considérons alors une paroi (hko), faisant l'angle θ avec la paroi (100). Son énergie peut s'écrire :

$$\gamma_d(hko) = \gamma_d(100) \cos\theta + \frac{\lambda}{d} \sin\theta \qquad \text{(II.16)}$$

en négligeant les interactions entre marches, ce qui doit être valable même aux forts θ ($\rightarrow 45°$) compte tenu de la décroissance

rapide avec leur distance de l'interaction entre deux rangées de dipôles (cf. formule II.5).

On peut considérer deux types de marches élémentaires représentés figure 11. L'énergie de la marche de la figure 11a dépend de la position de la paroi : elle varie suivant que la position de la marche est entre une rangée d'Oxygène et une rangée de Baryum ou bien une rangée de Titane et une rangée d'Oxygène, prenant successivement les valeurs λ_1' et λ_1''. L'énergie λ_2 de la marche représentée figure 11b est indépendante de la position de la paroi ; elle permet donc à elle seule de décrire la paroi (hko). On peut écrire :

$$\lambda_2 = \lambda_1' + \lambda_1'' + \lambda_I$$

λ_I représente un terme d'interaction entre les deux marches élémentaires possibles de la figure 11.

Le calcul des énergies λ_1 et λ_2 nécessite un regroupement des interactions dipôlaires par rangées suivant les méthodes développées précédemment. Quand on se limite aux premières rangées, en écrivant (2c 3e) l'énergie d'interaction (par distance a) des rangées 2c et 3e (cf. figure 11b) dans l'état ferroélectrique on obtient :

$$\lambda_1' = -2(2c\ 3c)/\varepsilon_\infty$$

$$\lambda_1'' = -2(2d\ 3d)/\varepsilon_\infty$$

$$\lambda_I = -2\left[(2c\ 3d) + (3c\ 4d) + 2(1c\ 3d) + 2(2c\ 4d)\right]/\varepsilon_\infty$$

On a négligé les interactions du type (2c 5d) etc... une approximation du même ordre que celle qui nous a permis de calculer les A_{ij}. On obtient tous calculs faits :

$$\varepsilon_\infty \lambda_1' = 7{,}95\ \mu_2\ \mu_4/a^4$$

$$\varepsilon_\infty \lambda_1'' = (7{,}95\ \mu_3\ \mu_4 - 10{,}30\ \mu_1\ \mu_4)/a^4$$

$$\varepsilon_\infty \lambda_I = (-2{,}24\ \mu_4\ \mu_5 - 2{,}24\ \mu_2\ \mu_3 + 2{,}12\ \mu_1\ \mu_2)/a^4$$

Soit en utilisant les moments dipôlaires déterminés dans l'introduction :

$$\lambda_1' = 0{,}081\ a^2\ P^2/\varepsilon_\infty$$

$$\lambda_1'' = 0{,}345\ a^2\ P^2/\varepsilon_\infty$$

$$\lambda_I = -\ 0{,}106\ a^2\ P^2/\varepsilon_\infty$$

On en déduit :

$$\lambda_d(hko) \simeq (0{,}229 \cos\theta + 0{,}320 \sin\theta)\ a\ P^2/\varepsilon_\infty \qquad \text{(II.17)}$$

et en particulier :

$$\lambda_d(45°) \simeq 0{,}388\ a\ P^2/\varepsilon_\infty > \lambda_d(100) \simeq 0{,}229\ a\ P^2/\varepsilon_\infty$$

IV. CALCUL DE L'ENERGIE D'ECHANGE D'UNE "PAROI A 180°".

Nous évaluerons dans ce paragraphe l'ordre de grandeur de la contribution γ_e des termes d'échange à l'énergie de paroi. On déterminera d'abord l'ordre de grandeur des paramètres qui interviennent dans l'énergie d'échange.

IV.1. Evaluation des termes d'échange.

Nous prendrons comme il est usuel[5] l'énergie d'interaction d'échange entre deux ions Titane et Oxygène plus proches voisins (distants de r) sous la forme $\lambda e^{-r/\rho}$. En négligeant les répulsions entre ions plus éloignés, l'énergie du Titanate dans la phase cubique peut s'écrire par molécule (de volume $V = 8r^3$) :

$$E = 6\lambda e^{-r/\rho} - \alpha_a e^2/2r$$

α_a étant la constante de Madelung de la structure. Les constantes λ et ρ se déterminent à partir des conditions usuelles pour la distance r d'équilibre :

$$\frac{\partial E}{\partial r} = 0$$

et
$$\frac{1}{K} = \frac{1}{3(s_{11}+2s_{12})} = V\,\frac{\partial^2 E}{\partial V^2} = \frac{1}{72r}\,\frac{\partial^2 E}{\partial r^2}$$

où K est la compressibilité déduite des compliances élastiques s_{11} et s_{12}. On obtient facilement :

$$\frac{r}{\rho} = 2 + \frac{144r^4}{\alpha_a e^2 K}$$

$$\text{et} \quad \lambda = \frac{\alpha_a e^2}{r}\,\frac{\rho}{r}\,\frac{1}{12}\,e^{r/\rho} \qquad \text{(II.18)}$$

La constante de Madelung α_a dans la phase cubique dépend évidemment des charges ioniques. On peut montrer qu'elle s'exprime comme une combinaison linéaire des constantes de Madelung des structures NaCl, CsCl et Cu_2O. En supposant comme dans la première partie que les charges sur les ions Ti, Ba et O sont respectivement égales à $Z < 4$; 2 et $-(2+Z)/3$, on obtient :

$$\alpha_a(BaToO_3) = \frac{(2+Z)^2}{3}\left[-\frac{(4-Z)}{2+3}\alpha_a(NaCl) - \frac{3Z(Z+8)}{(2+Z)^2}\alpha_a(CsCl) + 2\alpha_a(Cu_2O)\right] \quad (II.19)$$

Soit avec $Z = 2$:

$$\alpha_a = 19,8016$$

La réduction de charge du Titane modifie donc sérieusement la constante de Madelung puisque pour une structure parfaitement ionique ($Z = 4$) on obtient $\alpha_a = 49,52$.

Avec $\alpha_a = 19,8$; $r = 2,006$ et les compliances élastiques mesurées dans la phase cubique[23] : $s_{11} = 0,833$ et $s_{12} = -0,268.10^{-12}$ cm^2 $cyne^{-1}$ on obtient :

$$\frac{r}{\rho} = 7,729 \qquad \rho = 0,260\ \mathring{A} \quad \text{et} \quad \lambda = 5,582\ 10^{-9}\ \text{ergs} \quad (II.20)$$

IV.2. Contribution à l'énergie de paroi.

Nous supposerons que les paramètres λ, ρ déterminés précédemment dans la phase cubique ne sont pas modifiés dans la transition ferroélectrique qui modifie seulement les distances entre voisins.

Au voisinage d'une paroi, la distance Titane Oxygène est modifiée pour les paires d'ions perpendiculaires à la paroi (cf. figure 1). En conservant l'équidistance des plans atomiques, il en résulte une contribution γ_e à l'énergie de paroi due à l'échange :

$$\gamma_e \simeq \frac{\lambda}{ac}\left\{\exp(-\frac{a}{2\rho}) - \exp\left[-\frac{a}{2\rho}(1 + 16\frac{\delta z_1^2}{a^2})^{1/2}\right]\right\}$$

soit $$\gamma_e \simeq \frac{4\delta z_1^2}{\rho c a^2}\lambda e^{-a/2\rho} \qquad \text{(II.21)}$$

a et c sont les paramètres de la maille tétragonale.
Avec a = 3,992 Å, c = 4,036 Å et $\delta z_1 = -\delta z_4 = 0{,}06$ Å on obtient en utilisant (II.20 et 21) :

$$\gamma_e \simeq 22 \text{ ergs cm}^{-2}$$

Soit finalement une énergie γ de paroi :

$$\gamma = \gamma_d + \gamma_e = 32 \text{ ergs cm}^{-2}$$

Ce résultat est du même ordre de grandeur et un peu supérieur aux estimations déjà citées. A peu près les deux tiers de l'énergie viennent de l'échange, un résultat qui n'était pas évident à priori. En particulier dans la référence[21] la contribution d'échange est négligée, les auteurs supposant que la polarisation est due au déplacement des seuls ions Titane.

Nous n'avons pas tenu compte d'une dilatation possible du réseau perpendiculairement à la paroi. On obtient ainsi une surestimation de γ, un écartement éventuel des plans réduisant surtout γ_e. Il semble actuellement difficile d'évaluer quantitativement cette relaxation compte tenu des modèles grossiers utilisés pour évaluer les différents paramètres (charges ioniques, moments dipôlaires, λ, ρ, ..). L'énergie de 32 ergs cm^{-2} ainsi obtenue doit donc être considérée comme une surestimation de γ qui ne pourrait être améliorée que par une meilleure connaissance des positions des ions sur la paroi elle-même.

V. DISCUSSION.

En absence de champ appliqué le ferroélectrique se décompose en domaines pour réduire son énergie de dépolarisation. La mesure de la largeur a des domaines représentés figure 12 permet en principe de déterminer expérimentalement l'énergie γ de paroi comme on voit facilement en transposant le cas analogue d'un ferromagnétique.

Si U_p est l'énergie de paroi par unité de surface libre du cristal et $U_{él}$ l'énergie des charges de polarisation on obtient[24] pour l'énergie U de la configuration représentée figure 12(par unité de surface libre) :

$$U = U_p + U_{él} = \frac{\gamma a}{e} + 1,7\ P^2 a$$

Cette énergie est minimum pour :

$$a = \left(\frac{\gamma e}{1,7}\right)^{1/2} \frac{1}{P} \qquad \text{(II.22)}$$

elle vaut alors :

$$U_{min} = 2P(1,7\gamma e)^{1/2}$$

avec $\gamma = 32$ ergs cm^{-2}, $e = 0,1$ cm et $P = 7,8.10^4$ e.s.u. On obtient $a \simeq 0,2\mu$ et $U_{min} = 4.10^5$ ergs cm^{-2}.

a est bien de l'ordre de grandeur des largeurs de domaines observées[24], confirmant ainsi l'ordre de grandeur de la valeur obtenue pour l'énergie de paroi γ.

L'énergie U_{min} correspond à une énergie $U_{min}/e \simeq 4.10^6$ ergs/cm^3 par unité de volume. On voit que la réduction d'énergie due à la décomposition en domaine est très élevée puisque pour un monodomaine l'énergie du cristal serait approximativement égale à $P^2 \simeq 6.10^9$ ergs/cm^3.

Dans les ferroélectriques les charges responsables de l'énergie de dépolarisation $U_{él}$ peuvent être compensées, dans les

formules précédentes, il faut alors remplacer P par αP avec $\alpha < 1$, ces formules donnent donc une valeur minimum de la largeur a des domaines et les résultats ne peuvent être pris que comme des ordres de grandeur.

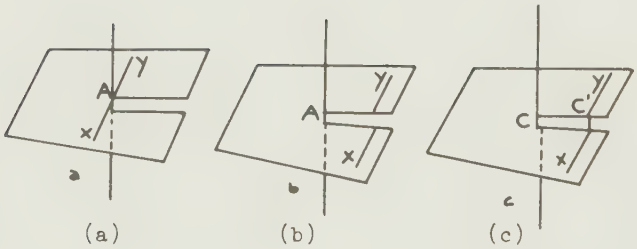
CHAPITRE III

PROPAGATION DE DEFAUTS D'EMPILEMENT DANS LES METAUX ECROUIS.

Les métaux et alliages cubiques à faces centrées se déforment par propagation de nombreuses fautes d'empilement et de macles mécaniques quand on les soumet à des efforts mécaniques violents. Les contraintes nécessaires au développement de ces défauts ont été mesurées par traction à froid[25], nous montrerons qu'on peut en déduire une mesure de l'énergie de faute d'empilement. Dans un premier paragraphe nous étudierons les différentes contraintes qui s'opposent au développement d'une faute d'empilement dans un métal écroui. Nous montrerons que le principal obstacle peut être attribué aux réactions attractives entre la dislocation de Shockley qui propage la faute et les dislocations produites par l'écrouissage qui percent le plan de faute (arbres). Nous étudierons en détail dans la deuxième partie ces interactions à courtes distances avec les arbres attractifs. Dans le troisième paragraphe nous étudierons la formation des dipôles obtenus quand la faute traverse les arbres. Ces dipôles doivent empêcher la formation de défauts ponctuels lors de la déformation ; ils se réunissent peu à peu en plus grands dipôles et permettent finalement la multiplication du défaut d'empilement quand celui-ci a pris une extension suffisante. Ce mécanisme de multiplication des défauts d'empilement sera précisé dans la dernière partie.

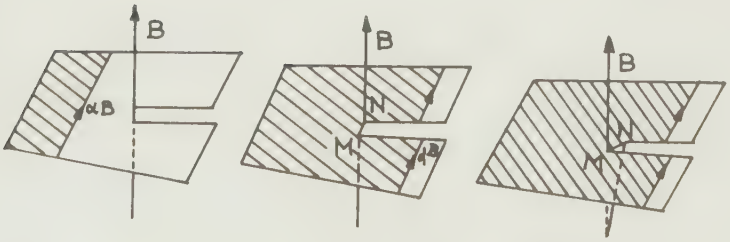
(a) Tétraèdre (b) position dans le réseau C.F.C.

Fig. 13 - Tétraèdre de Thompson et son symétrique par rapport au plan (a).



(a) (b) (c)

Fig. 14 - Dipôle équivalent aux deux crans dans la traversée d'un arbre par une dislocation parfaite.



(a) (b) cas général (cran MN en dehors du plan (a)). (c) cas particulier (cran MN dans le plan (a)).

Fig. 15 - Dipôle de dislocations de Shockley dans la traversée d'un arbre par une dislocation de Shockley.

I. CONTRAINTES NECESSAIRES A LA PROPAGATION D'UNE FAUTE D'EMPILEMENT ISOLEE.

Nous supposerons que l'écrouissage a produit un réseau tridimensionnel assez uniforme et assez dense de dislocations parfaites dont la longueur moyenne sera dénotée par l_F. Ces conditions schématisent sans doute de façon raisonnable le stade II de fort durcissement d'écrouissage dans les métaux cubiques à faces centrées[27].

Les dislocations du cristal parfait seront décrites à l'aide du tétraèdre de Thompson[28] ABCD, d'arrête B, construit sur 4 atomes plus proches voisins (figure 13).

On étudiera le glissement dans le plan dense (a) (opposé à A) de la dislocation de Shockley de vecteur de Burgers $\overrightarrow{\alpha B}$ de longueur $b = B/\sqrt{3}$. Pour fixer les idées, nous ne considérerons que des fautes intrinsèques, ce qui semble justifié par certaines observations[29]. De toute façon le cas des fautes extrinsèques relève d'une analyse similaire.

Les dislocations du réseau produit par l'écrouissage sont dissociées en deux partielles de vecteurs de Burgers $\vec{b}_1$ et $\vec{b}_2$ limitant un ruban de faute. Sous contrainte nulle ces deux partielles sont séparées d'une distance d telle que leur répulsion $\frac{\mu \vec{b}_1 \vec{b}_2}{2\pi(1-\nu)d}$ équilibre la tension de faute γ. On obtient[12] donc :

$$d(0) = \frac{\mu \vec{b}_1 \vec{b}_2}{2\pi(1-\nu)\gamma}$$

Sous l'action d'une contrainte appliquée favorablement orientée qui tend à séparer les partielles cette dissociation devient :

$$d(\sigma) = \frac{d(0)}{1 - \frac{\sigma b}{\gamma}}$$

On doit donc s'attendre à ce que la faute s'élargisse à tout le

cristal pour une contrainte σ_o telle que :

$$\sigma_o = \frac{\gamma}{b} \qquad \text{(III.1)}$$

Dans le cristal réel cette formule doit être modifiée pour deux raisons : les rubans de faute ont une longueur finie l (en fait les longueurs des dislocations du réseau produit par l'écrouissage) et les partielles doivent se propager à travers la forêt constituée par les autres dislocations. On doit donc ajouter à σ_o un terme σ_s qui tient compte de la longueur finie des "sources" et un terme σ_f dû à la friction du réseau de Frank. La contrainte σ qui permet aux fautes de s'élargir à tout le cristal peut donc s'écrire :

$$\sigma = \sigma_o + \sigma_s + \sigma_f \qquad \text{(III.2)}$$

σ_s correspond pratiquement à la nécessité d'amener les deux partielles en position d'instabilité par un mécanisme analogue à l'activation des sources de Frank et Read qui produisent les dislocations parfaites et on peut écrire[12] :

$$\sigma_s = \alpha_s \, \mu b/l \qquad \text{(III.3)}$$

où α_s est un coefficient numérique de l'ordre de l'unité. En prenant pour l la longueur des plus grandes dislocations les mieux orientées du réseau $l \gg l_F$ et σ_s devient négligeable devant σ_o ou σ_f que nous allons maintenant étudier en détail.

La propagation d'une dislocation de Shockley à travers un réseau de Frank donne lieu aux mêmes interactions que celle d'une dislocation parfaite :

- interaction à grandes distances[30] avec les portions du réseau qui ne percent pas le plan de faute

- interaction à courte distance[31] avec les dislocations attractives qui percent le plan de faute (arbres)

- interaction avec les arbres répulsifs.

Nous estimerons ici ces interactions par des raisonnements physiques simples. Comme pour une dislocation parfaite, c'est la traversée des arbres attractifs qui donne la contribution la plus importante à la force de frottement et c'est pourquoi nous en donnerons une analyse quantitative détaillée dans le deuxième paragraphe.

(a) Interaction à courte distance avec les arbres attractifs.

La dislocation de Shockley mobile peut se recombiner avec les arbres attractifs qu'elle rencontre, pour donner des barrières plus ou moins stables. Pour rompre ces recombinaisons, il faut une contrainte indépendante de la température[31] (plus précisément le rapport σ/μ est indépendant de la température), que l'on peut mettre sous la forme :

$$\sigma_f = \mu b/\alpha' l_F \qquad \text{(III.4)}$$

On peut évaluer l'ordre de grandeur de α' en remarquant que le durcissement obtenu doit être supérieur au durcissement qui correspondrait à des arbres de vecteur de Burgers $b = B/\sqrt{3}$, et inférieur au durcissement qui correspondrait à une dislocation de Shockley aussi rigide que les arbres de vecteur de Burgers B, soit :

$$\mu b/\alpha l_F < \mu b/\alpha' l_F < \mu B/\alpha l_F$$

ou $$\alpha/\sqrt{3} < \alpha' < \alpha$$

On doit donc avoir :

$$\alpha' \simeq \alpha \simeq 4 \qquad \text{(III.5)}$$

Le paragraphe II confirmera ce résultat par un calcul précis de α' et α.

(b) Interaction avec les arbres répulsifs.

Les interactions à grandes distances avec les arbres répulsifs sont nécessairement plus faibles qu'avec les arbres attractifs : cette conclusion que l'on peut déduire[32] de la flexibilité des dislocations de Shockley peut être vérifiée numériquement par calcul calqué sur celui fait pour les dislocations parfaites. Nous négligerons donc ces interactions.

Comme pour les dislocations parfaites, la traversée des arbres répulsifs peut donner lieu en outre à une contribution thermique de la force de frottement. Cette contribution correspond à la formation thermique du cran MN de la figure 15. La contrainte maxima, au 0°K, due à ce terme peut s'écrire[12] :

$$\sigma_1 \simeq U_c/l_F bd$$

où U_c est l'énergie du cran et d la largeur de l'arbre. On peut estimer[12] que l'énergie du cran est de l'ordre de :

$$U_c \lesssim \mu B^2 d/30$$

D'où une contrainte $\sigma_1 < \mu b/10 l_F$ négligeable par rapport à σ_f.

(c) Interaction avec les dislocations du réseau qui ne percent pas le plan de faute.

Ces dislocations produisent des contraintes internes qui fluctuent avec une amplitude de l'ordre de $\mu B/2\pi l_F$ et une longueur d'onde de l'ordre de l_F. Sous l'action de ces contraintes, la dislocation de Shockley peut se courber localement avec un rayon de courbure minimum $2\pi l_F/\sqrt{3}$. Ce rayon est assez grand vis-à-vis de la longueur d'onde des contraintes internes pour que celles-ci n'offrent à la dislocation de Shockley qu'une contrainte de frottement bien inférieure à leur amplitude maximum $\mu B/2\pi l_F$, donc également négligeable devant σ_f.

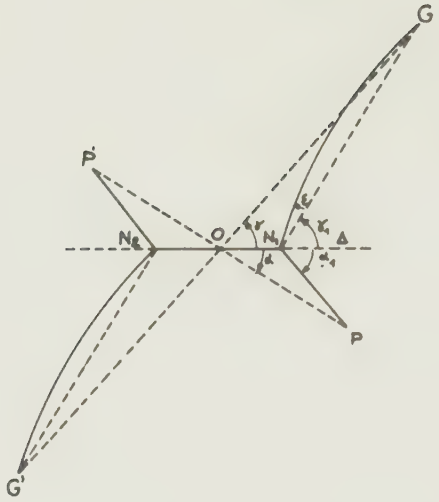


Fig. 16 - Capture d'une dislocation de glissement G G' par un arbre attractif P P'.

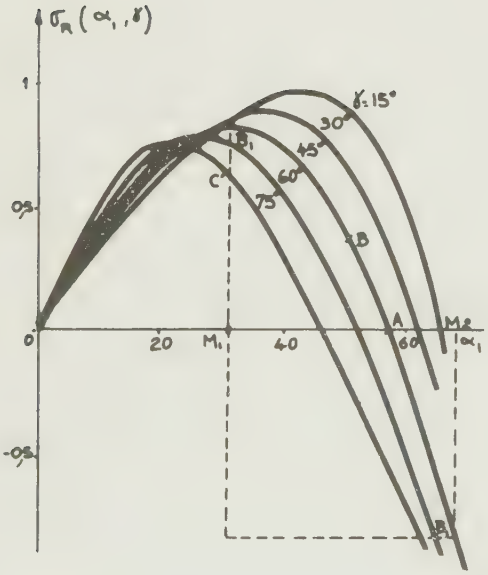


Fig. 17 - $\sigma_R(\alpha_1, \gamma)$ pour $\alpha = 40°$.

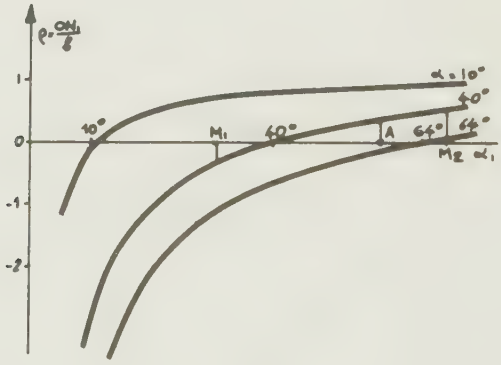


Fig. 18 - $\rho(\alpha_1)$ pour différentes valeurs de α.

En conclusion la contribution prépondérante à σ_f vient des arbres attractifs et nous allons maintenant évaluer le coefficient α' (III.4) de façon précise.

II. INTERACTION A COURTE DISTANCE AVEC LES ARBRES ATTRACTIFS.

Dans la géométrie particulière des métaux cubiques à faces centrées deux dislocations parfaites de même énergie sont susceptibles de se recombiner en produisant une troisième dislocation qui a la même énergie que chacune des deux autres. Le cas d'une dislocation de Shockley qui réagit avec une parfaite est moins simple : la dislocation résultante n'a pas la même énergie que les deux autres et peut même avoir des énergies différentes suivant la nature des dislocations parfaites. Avec les notations de la figure 13, on constate qu'une dislocation de Shockley de vecteur $\overrightarrow{B\alpha}$ peut par réaction avec un arbre attractif donner trois types de dislocation recombinée suivant le vecteur de Burgers de l'arbre :

- $\overrightarrow{CA}$(b) ou (d) et $\overrightarrow{DA}$(b) ou (c) donnent des barrières de tension de ligne égale à 1 (en prenant comme unité la tension de ligne des arbres).
- $\overrightarrow{AB}$(c) ou (d) donnent des barrières de tension de ligne égale à 2/3.
- $\overrightarrow{CB}$(d) et $\overrightarrow{DB}$(c) donnent des barrières de tension de ligne égale à 1/3.

Par $\overrightarrow{CA}$(b) nous désignons comme il est usuel un arbre de vecteur de Burgers $\overrightarrow{CA}$ et de plan de glissement (b) (plan opposé au somment B du tétraèdre de la figure 13). Seuls les arbres $\overrightarrow{CB}$(d) et $\overrightarrow{DB}$(c) donnent des recombinaisons glissiles dans le plan de faute, les autres sont complètement sessiles dans ce plan.

II.1. Modèle utilisé. Etude des résultats.

Nous nous servirons d'un modèle déjà utilisé[33] dans le cas des dislocations de glissement parfaites mais en y apportant quelques modifications.

La dislocation de glissement GG' (parfaite ou Shockley), dans son plan de glissement P_1 rencontre en O une dislocation parfaite PP' située dans un plan P_2. PP' et GG' font les angles α et γ avec l'intersection Δ des plans P_1 et P_2. Nous supposerons de plus que PP' et GG' se coupent en leur milieu.

PP' et GG' se recombinent partiellement pour donner une dislocation N_1N_2 suivant Δ (figure 16).

Ces interactions attractives fixent la longueur et l'amplitude des zig-zags étudiés en II.2 et la contrainte d'arrachement à un arbre.

On néglige les interactions élastiques à grandes distances et on suppose que la dislocation parfaite n'est pas dissociée. On suppose d'autre part que la dislocation recombinée est sessile. Nous avons vu que c'était généralement le cas pour une dislocation de glissement de Shockley, dans le cas de dislocations de glissement parfaites on a pu montrer[33] que cette hypothèse ne devait pas modifier sensiblement les résultats.

Cas d'une dislocation de glissement de Shockley.

Nous prendrons comme tensions de ligne de l'arbre, de la partie recombinée et de la dislocation de Shockley : $\tau = \frac{1}{2}\mu B^2$, $\beta\tau$ et $\frac{1}{3}\tau$. Le paramètre β qui définit la barrière est égal à 1/3, 2/3 ou 1.

On constate facilement en étudiant l'équilibre des deux noeuds triples N_1 et N_2 que la réaction ne peut se produire que pour :

$$\frac{1}{3}\cos\gamma + \cos\alpha \geqslant \beta \qquad \text{(III.6)}$$

L'arbre PP' de longueur 2l est fixé en P et P'. Nous supposerons de plus que la contrainte résolue dans son plan de glissement est nulle.

En effet, cette contrainte est tantôt d'un signe tantôt de l'autre suivant l'orientation du plan de glissement de l'arbre, elle est donc nulle en moyenne. Nous supposerons enfin que la dislocation GG' de longueur 4kl est fixée en G et G'. La valeur du paramètre k est évidemment liée à la distance D_a entre arbres attractifs le long de la dislocation de glissement. Nous évaluerons cette distance dans la partie II.2. Nous ferons les calculs pour k = 1, on peut en effet démontrer[26][33] que la contrainte réduite $\sigma_R = 2kl\sigma/\mu b$ reste pratiquement indépendante de k quand $k \geqslant 1$. Avec ces conventions on peut écrire (cf. figure 16) :

$$OG = OG' = 2OP = PP' = 2l$$

$$ON_1 = l \sin(\alpha_1 - \alpha)/\sin \alpha_1$$

$$ON_1 + N_1G \cos \gamma_1 = 2kl \cos \gamma$$

$$N_1G = 2kl \sin \gamma/\sin \gamma_1 = 2R \sin \varepsilon$$

A l'aide de la contrainte réduite $\sigma_R = 2kl\sigma/\mu b$, l'équilibre de l'arc N_1G sous l'action de la contrainte σ s'écrit en utilisant les relations précédentes :

$$\sigma_R = \sin \gamma_1 \sin \varepsilon/\sin \gamma \qquad \text{(III.7)}$$

L'équilibre du point triple N_1 impose :

$$\cos \alpha_1 + \frac{1}{3} \cos(\gamma_1 + \varepsilon) = \beta \qquad \text{(III.8)}$$

Enfin en utilisant les relations précédentes on peut écrire :

$$\sin(\alpha_1 - \alpha)/\sin \alpha_1 = 2k \sin(\gamma_1 - \gamma)/\sin \gamma_1 = ON_1/l = \rho \qquad \text{(III.9)}$$

Pour α et γ fixés satisfaisant à (III.6), les équations (III.7,8 et 9) permettent de déterminer la contrainte en fonction

de l'angle α_1. Compte tenu de la condition (III.6), les résultats diffèrent suivant la valeur de β. Nous nous contenterons ici d'étudier le cas où la barrière a une énergie définie par $\beta = 3/4$, valeur moyenne sur tous les arbres attractifs possibles de l'énergie de ligne de la partie recombinée (4 fois $\beta = 1$, 2 fois $\beta = 2/3$ et 2 fois $\beta = 1/3$).

Nous avons en effet pu montrer[26] que la contrainte nécessaire pour arracher une barrière d'énergie moyenne est, à une bonne approximation, égale à la moyenne des contraintes d'arrachement des barrières de différentes énergies.

Avec $\beta = 3/4$ la condition (III.6) devient :

$$\frac{1}{3} \cos \gamma + \cos \alpha \geqslant 3/4 \qquad \text{(III.6a)}$$

ce qui nécessite en particulier $\cos \alpha > 5/12$ soit $\alpha \lesssim 65°$.

Nous avons effectué numériquement les calculs pour $k = 1$ et α variant de 10° en 10° depuis 10° jusqu'à 64°. Pour chaque valeur de α , nous avons tracé les courbes $\sigma_R(\alpha_1)$ pour γ variant de 15° en 15° depuis 15° jusqu'à la valeur maximum déterminée par (III.6a). Le réseau de courbes $\sigma_R(\alpha_1,\gamma)$ correspondant à $\alpha = 40°$ est représenté figure 17. Comme dans le cas de dislocations parfaites, les courbes $\sigma_R(\alpha_1)$ passent par un maximum, s'annulent et deviennent négatives, les parties négatives ne présentant pas de minimum.

Parallèlement à ces courbes, nous avons représenté (figure 18) la courbe représentant $\rho = ON_1/l$ en fonction de α_1 également pour $\alpha = 40°$.

On obtient les résultats suivants :

(a) Les parties négatives des courbes $\sigma_R(\alpha_1)$ décrivent en fait l'évolution du noeud N_2[33] et de l'arc N_2G' sous l'action de σ en l'absence d'activation thermique.

(b) Les parties positives présentent un maximum. Pour une contrainte supérieure à ce maximum l'équilibre de la dislocation mobile de Shockley est impossible. Décrivons par exemple ce qui se passe pour $\alpha = 45°$ et $\gamma = 45°$. Sous contrainte nulle la réaction se produit (III.6a) étant satisfaite et on obtient un angle α_1 d'équilibre correspondant au point A de la figure 17. Quand la contrainte augmente l'angle α_1 diminue et le point B correspondant décrit la courbe AB_1. Quand σ_R atteint la valeur correspondant à B_1 l'arc GN_1 se développe en spirale, N_1 se déplaçant vers N_2. La figure 18 permet de déterminer α_1 correspondant au maximum (point M_1) c'est-à-dire à l'aide de la figure 18 la valeur de $\rho = ON_1/l$ au moment où le système devient instable.

On peut aussi en construisant B_2 tel que $M_1B_1 = M_2B_2$ (voir figure 17) et en reportant M_2 sur la figure 18 connaître ON_2/l donc finalement $N_1N_2/l = ON_1/l + ON_2/l$ au moment critique. On constate sur la figure 18 que pour $\gamma = 45°$ et $\alpha = 40°$ au moment où l'axe GN_1 devient instable le noeud N_1 est passé à gauche de O ($ON_1 < 0$) mais n'a pas rattrapé le noeud N_2 ($ON_2 > |ON_1|$) c'est-à-dire que la contrainte nécessaire à l'arrachement correspond bien au point B_1 maximum de la courbe $\sigma_R(\alpha_1)$.

(c) Il peut toutefois se produire que le noeud N_1 rattrape le noeud N_2 <u>avant</u> que la contrainte maximum soit atteinte. On tient facilement compte de cet effet en utilisant la construction précédente pour chaque poinr B de la courbe $\sigma_R(\gamma_1)$ en recherchant la position qui annule N_1N_2/l. Par exemple pour $\alpha = 40°$ et $\gamma = 75°$ on montre ainsi que le point C ($\sigma_R = 0,65$) satisfait à cette condition. En négligeant ici cet effet et en prenant comme contrainte critique la contrainte du maximum on ferait une erreur supérieure à 20 %.

L'analyse précédente montre que dans tous les cas, on peut pour chaque couple de valeurs α, γ déterminer la contrainte $\sigma_R^{(C)}(\alpha,\gamma)$ qui détruit les recombinaisons.

(d) Ces courbes permettent également de déterminer simplement la longueur de la recombinaison $\rho = 2ON_1/PP'$ sous contrainte nulle, ce qui nous permettra ultérieurement de déterminer l'énergie gagnée par recombinaison.

A partir de $\sigma_R^{(C)}(\alpha,\gamma)$ on obtient $\bar{\sigma}_R^{(C)}(\alpha)$ en moyennant sur les angles γ. On peut ensuite évaluer la moyenne de $\bar{\sigma}_R^{(C)}(\alpha)$ quand α varie de 0° à 65°. Pour cela on pondère $\bar{\sigma}_R^{(C)}(\alpha)$ par $\sin\alpha$, probabilité pour qu'un arbre PP' rencontre un plan de glissement. On obtient ainsi :

$$\bar{\sigma}_R = \frac{\int^{\alpha_M} \bar{\sigma}_R^{(C)}(\alpha)\sin\alpha d\alpha}{\int_0^{\alpha_M} \sin\alpha d\alpha} = 0,75 \qquad \text{(III.10)}$$

avec $\cos\alpha_M = 5/12$.

On trouvera le détail des calculs dans l'article déjà cité[26].

Cas d'une dislocation de glissement parfaite.

La condition (III.6) s'écrit ici :

$$\cos\gamma + \cos\alpha > 1 \qquad \text{(III.6b)}$$

Ce cas a été étudié avec le même modèle par Suada[33]. En tenant compte de la condition (III.6b) et du fait que le noeud N_1 peut rattraper le noeud N_2 avant que la maximum des courbes $\sigma_R(\alpha_1)$ soit atteint on obtient[33][26] :

$$\bar{\sigma}_R = \frac{2kl\bar{\sigma}}{\mu B} = 0,58 \qquad (B = \sqrt{3}\ b) \qquad \text{(III.11)}$$

Le modèle représente bien le cas d'une forêt de dislocations de longueur moyenne $l_F = 2l$ avec une distance $2kl = kl_F = Da$ entre points d'ancrages. Il nous faut maintenant déterminer ce paramètre k.

II.2. Energie gagnée par recombinaison. Distance entre arbres attractifs.

Si la dislocation de glissement (parfaite ou Shockley) n'interagissait pas avec les arbres attractifs du réseau, elle resterait droite sous contrainte nulle et la distance entre arbres attractifs le long de la ligne serait infinie. A cause de la valeur finie de cette énergie d'interaction ΔU, la dislocation prend une forme en zig-zag résultant d'un compromis entre sa tension de ligne et ΔU. La distance D_a entre arbres attractifs le long de la ligne est alors finie.

L'augmentation d'énergie ΔE due au zig-zag peut s'écrire, par unité de longueur le long de la direction moyenne de la dislocation (cf. figure 19) :

$$\Delta E = \tau_g \left\{ \left(1 + \frac{x^2}{D_a^2}\right)^{1/2} - 1 \right\} - \frac{\Delta U}{D_a}$$

$\tau_g = \tau$ (ou $\frac{1}{3}\tau$) pour une parfaite (ou une Shockley), x est la déviation du zig-zag. En régime permanent l'aire associée à un arbre attractif peut s'écrire :

$$2xD_a \simeq \alpha l_F^2 \qquad \text{(III.12)}$$

α étant le rapport du nombre d'arbres au nombre d'arbres attractifs. En tenant compte des conditions (III.6a et b) on peut montrer que $\alpha \simeq 2$ pour des parfaites et $\alpha \simeq 3{,}2$ pour des Shockley.

La distance D_a d'équilibre obtenue en minimisant ΔE par rapport à D_a peut s'écrire en supposant x/D_a suffisamment petit :

$$k = \frac{D_a}{l_F} \simeq \left(\frac{\alpha^2 \tau_g l_F}{2\Delta U}\right)^{1/3} \qquad \text{(III.13)}$$

L'énergie ΔU gagnée par recombinaison peut s'écrire en introduisant la longueur de recombinaison $\rho = N_1N_2/PP'$ et avec les notations de la figure 16 :

- Pour une dislocation de Shockley produisant une barrière de tension de ligne $\frac{3}{4}\tau$

$$\frac{\Delta U(\alpha\gamma)}{\tau l_F} = 1 - \left\{1+\rho^2-2\rho\cos\alpha\right\}^{1/2} + \frac{2}{3}k\left[1-\left\{1+\frac{\rho^2}{4k^2} - \frac{\rho}{k}\cos\gamma\right\}^{1/2}\right] - \frac{3}{4}\rho$$

- Pour une dislocation parfaite :

$$\frac{\Delta U(\alpha\gamma)}{\tau l_F} = 1 - \left\{1+\rho^2-2\rho\cos\alpha\right\}^{1/2} + 2k\left[1-\left\{1+\frac{\rho^2}{4k^2} - \frac{\rho}{k}\cos\gamma\right\}^{1/2}\right] - \rho$$

A partir de $\Delta U(\alpha,\gamma)$ on obtient $\overline{\Delta U}(\alpha)$ en moyennant sur les angles γ puisque nous avons vu comment déterminer ρ à contrainte nulle (pour $k = 1$). On moyenne ensuite $\overline{\Delta U}(\alpha)$ en pondérant par $\sin\alpha$. On obtient ainsi[26] :

$$\Delta U = \begin{cases} \tau l_F/10 \text{ pour une dislocation de glissement parfaite} \\ \tau l_F/20 \text{ pour une Shockley} \end{cases} \qquad \text{(III.14)}$$

En portant dans (III.13) on obtient finalement :

$$k = \frac{D_a}{l_F} = \begin{cases} 2{,}7 \text{ pour des parfaites} \\ 3{,}2 \text{ pour des Shockley} \end{cases} \qquad \text{(III.15)}$$

II.3. <u>Force de frottement due aux arbres attractifs</u>.

Les relations (III.10) (III.11) et (III.15) permettent finalement de déterminer les coefficients de durcissement α et α' définis par (III.4 et 5). Ils correspondent à la difficulté de propager une dislocation parfaite et une dislocation de Shockley à travers le réseau de dislocations créé par l'écrouissage ; supposé uniforme et homogène, comme c'est sans doute le cas dans les conditions de forte déformation où les fautes se propagent.

On obtient :

$$\alpha = \frac{\mu B}{\sigma^{\perp}_{F}} = 4,6 \qquad \text{(III.16)}$$

$$\text{et } \alpha' = \frac{\mu b}{\sigma^{\perp}_{F}} = 4,3$$

Ces résultats confirment bien les estimations faites au paragraphe Ia. Avant de les appliquer à l'étude de la propagation des fautes nous examinerons les conditions géométriques de cette propagation ce qui nous conduira à un mécanisme de multiplication des fautes sous certaines conditions.

III. FORMATION ET COALESCENCE DES DIPOLES.

En plus des forces de frottement étudiées jusqu'ici, analogues à celles qui interviennent dans la propagation des dislocations parfaites, il nous faut maintenant étudier un phénomène propre à la propagation des dislocation de Shockley : la formation de dipôles attachés aux arbres qui percent la faute. Nous montrerons que la contrainte qui en résulte est en général petite devant σ_f (III.4) ; mais que cette formation peut conduire à un processus de multiplication de la faute.

On sait que, quand le vecteur de Burgers d'un arbre n'est pas dans le plan de glissement d'une dislocation mobile parfaite qui le coupe, deux crans sont formés, l'un sur l'arbre, l'autre sur la dislocation mobile. En effet, l'arbre crée une marche sur le plan de glissement de la dislocation mobile. Géométriquement tout s'est passé comme si les deux branches AXAY de la dislocation mobile avaient tourné autour de l'arbre A (figure 14a) pour former un dipôle (figure 14b) qui s'annihile en formant les deux crans C et C' (figure 14c). Normalement le cran mobile C' glisse parallèlement à son vecteur de Burgers : les deux branches du dipôle équivalent sont des dislocations vis qui glissent l'une vers l'autre sans difficulté. Mais dans certaines conditions le cran peut être amené à monter rapidement hors de son plan de glissement ; le dipôle équivalent a alors un certain caractère coin : c'est ainsi qu'on explique en général la création de défauts ponctuels lors de l'écrouissage[12].

Si maintenant la dislocation mobile est une dislocation de Shockley, l'annihilation du dipôle n'est plus possible, au moins dans le système cubique à faces centrées : on sait en effet qu'on ne peut pas faire quitter son plan à une faute d'empilement sans créer, à l'intersection de deux plans, une dislocation imparfaite. Dans la structure cubique centrée on obtient des conclusions analogues. On sait en effet que dans cette structure une dislocation de Shockley ne peut changer de plan que si elle est

en position purement vis. Dans ces conditions on peut montrer facilement que la plupart des dipôles de Shockley créés dans la traversée de la forêt ne peuvent s'éliminer. L'absence de cran mobile ou son obligation de glisser sans monter empêche la formation de défauts ponctuels lors de la traversée des arbres.

En fait dans la structure C.F.C. deux solutions sont géométriquement possibles : dipôles de dislocations de Shockley ou dipôles de "stair rods". Ils correspondent dans une certaine mesure aux dipôles partiellement coin et dipôles vis de la dislocation parfaite.

Dipôles de dislocations de Shockley.

C'est la solution décrite figure 15 : après le passage d'un arbre A, la dislocation de Shockley laisse derrière elle un dipôle qui la réunit à l'arbre. Pour diminuer sa tension de ligne, le dipôle doit se placer dans la direction de propagation de la dislocation de Shockley. Celle-ci étant quelconque, le dipôle a en général un certain caractère coin.

L'arbre prend de ce fait un cran MN de vecteur de Burgers différent de celui de l'arbre.

La correspondance est évidemment, pour la géométrie usuelle de la figure 15b

$$\begin{aligned} \text{arbre } \overrightarrow{AD} &\rightarrow \text{cran } \overrightarrow{AD} + \overrightarrow{\alpha B} = \overrightarrow{CA'} \\ \overrightarrow{AC} &\rightarrow \quad \overrightarrow{AC} + \overrightarrow{\alpha B} = \overrightarrow{DA'} \\ \overrightarrow{AB} &\rightarrow \quad \overrightarrow{AB} + \overrightarrow{\alpha B} = \overrightarrow{CB} + \overrightarrow{DA'} = \overrightarrow{DB} + \overrightarrow{CA'} \end{aligned} \qquad \text{(III.17)}$$

La géométrie de la figure 15c (cran parallèle au plan (a)) n'est stable que dans 2/3 des cas avec un arbre $\overrightarrow{AB}$ et donne[26] :

$$\overrightarrow{AB} \rightarrow \overrightarrow{AB} - \overrightarrow{\alpha B} = \overrightarrow{A\alpha}$$

Dipôles de "stair-rods".

Pour un dipôle de dislocations de Shockley à caractère vis,

le cran MN précédent peut se dissocier en donnant lieu à un ruban de faute d'empilement limité par un dipôle de "stair-rods" (figure 20). Le cran sur la dislocation de Shockley peut alors glisser librement mais ne peut pas monter. La configuration est analogue à celle du cran normal dissocié sur une dislocation parfaite[12]. Comme pour le cran, cette dissociation n'est stable que pour une dislocation de Shockley presque coin ; ce cas a donc peu de chances de se produire et peut être négligé dans la suite[26].

Coalescence des dipôles.

La tension de ligne τ_d des dipôles produit sur la dislocation de Shockley mobile une force de frottement

$$\tau_d/l \quad ,$$

si l est l'équidistance des dipôles le long de la dislocation de Shockley. Le nombre des dipôles créés croît rapidement avec la distance L parcourue par la dislocation de Shockley, c'est-à-dire la largeur de la faute d'empilement qu'elle limite. Si tous les dipôles restaient parallèles, la force de frottement qu'ils produiraient arrêterait rapidement la propagation de la faute (figure 19a).

En effet on aurait :

$$Ll \simeq l_F^2$$

et

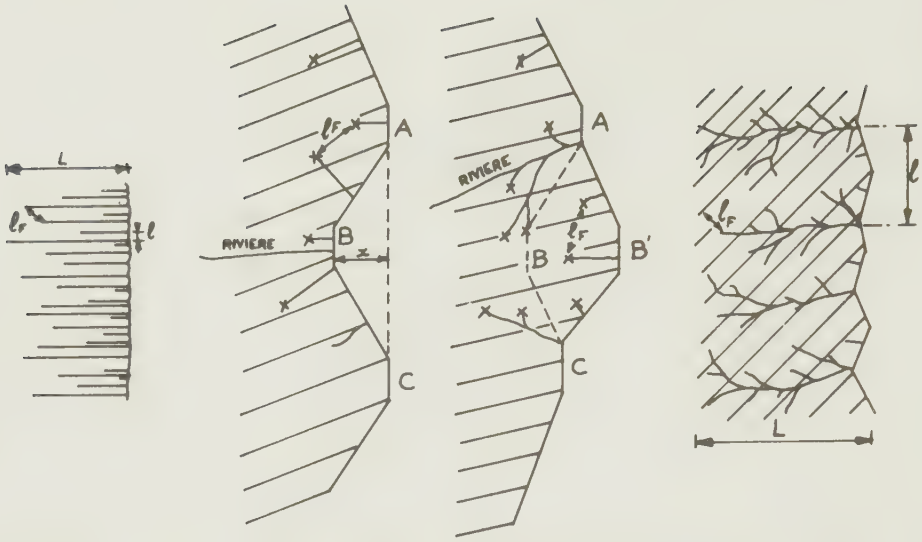
$$\tau_d \simeq \mu B^2/12$$

D'où une contrainte de frottement :

$$\sigma_d \simeq (\mu b/4l_F)(L/l_F) \qquad \text{(III.18)}$$

qui devient prohibitive par rapport à σ_f (III.4) dès que L dépasse quelques l_F.

En fait, comme nous l'avons vu en II.2 la dislocation de Shockley qui limite la faute ne reste pas droite mais prend une



(a)Dipôles élémentaires de stair-rod (cas exceptionnel).

(b) capture d'une Shockley par un arbre attractif B.

(c) après rupture de la recombinaison.

(d) rivières de dipôles de Shockley.

Fig. 19 - Propagation d'une dislocation de Shockley à travers le réseau de Frank.

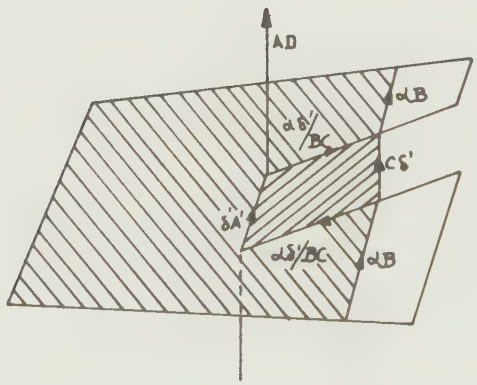


Fig. 20 - Dipôle de stair-rod créé à la traversée d'un arbre par une dislocation de Shockley (cas exceptionnel).

forme en zig-zag. Les courbures ainsi produites sur la dislocation de Shockley amènent les dipôles, s'ils sont mobiles, à converger vers les régions du zig-zag en retard sur les autres. En régime stationnaire, chaque fois qu'une boucle ABC quitte un arbre attractif B elle rencontre un autre arbre B' et un seul, créant de nouveaux dipôles au passage des arbres non attractifs coupant l'aire balayée (figure 19b). Afin de diminuer leur tension de ligne, les anciens dipôles qui convergeaient vers B vont maintenant se rassembler ou s'annihiler et converger soit vers A, soit vers C (figure 18c).

La figure 19a correspond donc au cas exceptionnel où tous les arbres seraient de même nature et donneraient tous des dipôles sessiles de "stair-rods" parallèles. Dans le cas usuel où les dipôles mobiles de Shockley prédominent, il faut tenir compte de leur recombinaison. Deux dipôles de signes opposés doivent s'annihiler en se rencontrant ; deux dipôles de même signe doivent donner un dipôle de hauteur double (figure 21).

Ces réactions élémentaires doivent donner lieu à un phénomène de rivières[34] (figure 18d) : la distance l entre rivières doit être à peu près égale au double de la distance D_a entre arbres attractifs le long de la dislocation de Shockley. Chaque dipôle élémentaire doit s'écouler dans la rivière la plus proche, après une longueur de l'ordre de D_a ; chaque rivière est constituée d'un dipôle multiple dont la hauteur h croît, par un processus stochastique, comme la racine carrée de la longueur L de la rivière, c'est-à-dire la largeur de la faute d'empilement :

$$h \simeq \beta b (L/l_F)^{1/2} \qquad \text{(III.19)}$$

avec un coefficient numérique β de l'ordre de l'unité.

A cause de cette formation de rivières, la contrainte σ_d' de frottement sur la dislocation mobile de Shockley croît beaucoup plus lentement avec L que dans le cas de dipôles restant parallèles :

$$\sigma'_d \simeq \frac{\tau_d(h)}{2bD_a} \simeq \frac{\mu b}{24 l_F} \text{Log} \frac{h}{b} \qquad \text{(III.20)}$$

On voit donc que la contrainte due aux dipôles reste négligeable vis-à-vis de σ_f due aux arbres attractifs (III.4) sauf quand la dislocation de Shockley a parcouru une distance L importante (ou $h/b \simeq e^5 \simeq 10^2$). Il se produit alors une instabilité des fautes d'empilement qui doit conduire à leur multiplication et sur laquelle nous reviendrons à la fin du paragraphe suivant.

On peut remarquer ici que la traversée d'un sous-joint par une faute doit donner une forte densité de dipôles de même signe résultant de la traversée des dislocations parallèles du sous-joint par la dislocation de Shockley qui propage la faute. On a une situation analogue à celle qui correspond à la traversée d'un sous-joint par une fissure de clivage. Dans ces conditions, les dipôles coalescent après avoir parcouru 5 à 10 fois leur distance initiale qui dépend de la désorientation θ des deux joints. Les rivières ainsi constituées démarrent avec une hauteur

$$h \simeq 2 l_F \theta / B.$$

IV. CONDITIONS DE PROPAGATION D'UNE FAUTE D'EMPILEMENT.

L'analyse précédente conduit aux conclusions suivantes :

Contrainte nécessaire à la propagation des fautes.

Une faute d'empilement peut se propager si la dislocation de Shockley mobile qui la limite est soumise à une contrainte peu fonction de la température et de l'ordre de :

$$\sigma \simeq \sigma_o + \sigma_f \simeq \gamma/b + \mu b/\alpha' l_F \qquad \text{(III.21)}$$

où γ est l'énergie de faute d'empilement et α' un coefficient numérique égal à 4,3 dans la structure C.F.C.

Comme les dislocations du réseau de Frank sont elles-mêmes mobiles sous une contrainte égale à :

$$\mu B/\alpha l_F \qquad (\alpha = 4{,}6 \text{ dans les C.F.C.}),$$

on voit que les fautes d'empilement ne se développent par écrouissage qu'au dessous d'une taille critique l_F du réseau de Frank donnée en ordre de grandeur par :

$$\frac{\gamma}{b} + \frac{\mu b}{\alpha' l_F} < \frac{1}{\theta}\,\frac{\mu B}{\alpha l_F} \qquad \text{(III.22)}$$

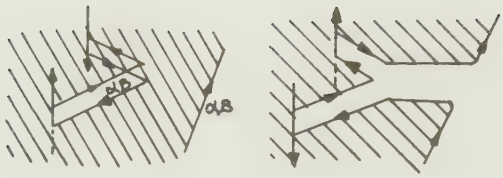
θ étant le rapport des contraintes résolues dans le plan de faute parallèlement aux vecteurs de Burgers $\vec{B}$ et $\vec{b}$ des dislocations parfaites et des dislocations de Shockley. On obtient ainsi :

$$l_F \lesssim \frac{\mu b B}{\gamma \alpha \theta}\left(1 - \theta\,\frac{\alpha b}{\alpha' B}\right) \qquad \text{(III.23)}$$

La contrainte minimum pour développer les fautes s'écrit donc :

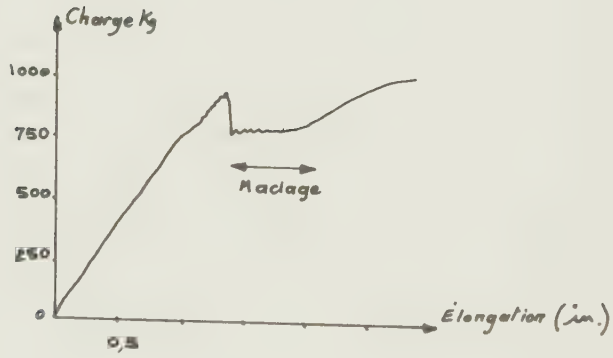
$$\sigma \gtrsim \frac{\gamma}{b}\left(1 - \theta\,\frac{\alpha b}{\alpha' B}\right)^{-1} \qquad \text{(III.24)}$$

On voit que la friction due au réseau de Frank ajoute un

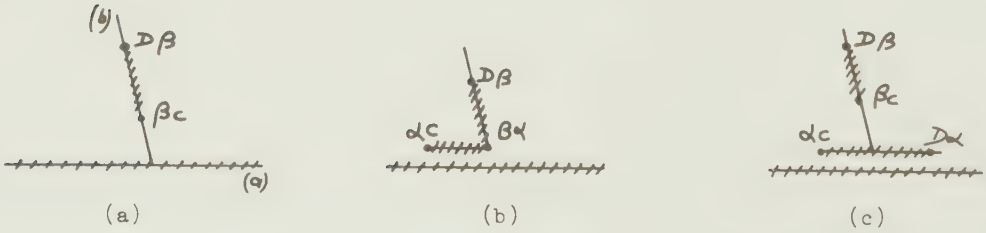


(a) de signes opposés (b) de même signe.

Fig. 21 - Coalescence de deux dipôles.



Fi. 22 - Courbe contrainte-déformation typique du cuivre à 4°K (d'après Blewitt et al[25].



(a) (b) (c)

Fig. 22 bis - Nucléation d'une macle à partir d'une faute d'empilement infinie.

terme important à la contrainte $\sigma_o = \gamma/b$ nécessaire pour développer les fautes dans un cristal parfait.

L'estimation du facteur de renforcement $(1 - \theta \frac{\alpha b}{\alpha' B})^{-1}$ est délicate, du fait qu'il dépend de façon sensible du facteur d'orientation θ assez mal connu. Pour les C.F.C. où $\frac{\alpha'}{\alpha} \simeq 1$ on obtient :

$$\sigma > \frac{\gamma}{b} \frac{1}{1 - \frac{\theta}{\sqrt{3}}} \qquad \text{et} \quad l_F < \frac{\mu B^2}{12\gamma}\left(\frac{\sqrt{3}}{\theta} - 1\right) \qquad \text{(III.25)}$$

Les fautes s'élargissent sur le plan (111) avec la dislocation de Shockley $\frac{1}{6}[\bar{2}11]$ quand l'axe de la traction atteint le côté [001], [$\bar{1}$11] du triangle d'orientation de base [001], [$\bar{1}$11], [011] [25].

Quand l'axe de traction parcourt ce côté de [001] à [$\bar{1}$11], θ décroit uniformément de $\sqrt{3}$ à $\sqrt{3}/2$. De $\theta > \sqrt{3}/2$ on déduit :

$$\sigma \gtrsim 2\gamma/b \qquad \text{et} \quad l_F < \mu B^2/12\gamma \qquad \text{(III.26)}$$

Nous insisterons sur la condition $l_F \lesssim 100B$ qui indique que, par écrouissage, on ne développe les fautes d'empilement que dans des conditions extrêmes :

- tractions à basses températures

- déformations hautement hétérogènes, entraînant des flexions de faible rayon de courbure (

D'autre part, le terme de propagation σ_f est du même ordre de grandeur que le terme de nucléation σ_o.

Par exemple, pour le cuivre[25], la contrainte d'apparition des fautes à 10°K est de l'ordre de $\mu/300$; nous en déduisons une estimation de la tension de faute d'empilement :

$$\gamma \simeq 10^{-3}\ \mu B \simeq 10 \text{ ergs cm}^{-2} \quad \text{et } l_F \simeq 100B.$$

Cette estimation semble inférieure à celles déduites de l'observation en microscopie électronique[35] des noeuds triples

dissociés. On obtient ainsi plutôt 30 ergs cm^{-2} comme énergie de faute du cuivre. On peut toutefois remarquer que ces observations se font sur des alliages et que la valeur du cuivre pur n'est obtenue que par extrapolation. Des études récentes semblent indiquer que les valeurs réelles se situent en dessous des valeurs extrapolées[36].

Stabilité des fautes créées.

La force de frottement due au réseau, qui s'oppose au développement des fautes, doit aussi les stabiliser quand la contrainte appliquée qui les a développées est enlevée. Ce fait explique la stabilité des fautes développées par écrouissage.

En effet, la dislocation de Shockley qui borde une faute est maintenant soumise à une contrainte de friction de l'ordre de $\mu b/\alpha' l_F$ qui s'oppose à la contrainte de rappel γ/b qui d'après ce qui précède est de l'ordre de $\frac{\mu}{l_F}(\frac{B}{\alpha} - \frac{b}{\alpha'})$. La force de friction l'emporte sur la force de rappel, du fait que :

$$\alpha'/\alpha \leqslant 1 < 2b/B = 2/\sqrt{3}$$

Multiplication des fautes.

Nous avons vu plus haut que, quand une faute prend une trop grande extension L, la contrainte σ_d' due aux dipôles devient importante et devrait la bloquer. D'autre part quand la hauteur des dipôles devient suffisante, la contrainte appliquée suffit à séparer les dislocations de Shockley qui les constituent. La réunion de ces deux conditions

$$\sigma_d' \simeq \frac{\mu b}{2\pi l} \operatorname{Log} \frac{h}{b} < \frac{\mu b}{\alpha' l_F} \qquad \text{avec} \quad l \simeq 2D_a \simeq 6l_F$$

$$\text{et} \quad \frac{\mu b}{2\pi h} \simeq \frac{\mu b}{\alpha' l_F} \qquad \text{soit} \quad h \simeq l_F/2$$

montre que les dipôles se dissocient en dislocations de Shockley

indépendantes avant de bloquer la faute pour :

$$\mathrm{Log}\,\frac{l_F}{2b} \lesssim \frac{2\pi l}{\alpha' l_F} \simeq 9$$

soit $$l_F \lesssim 10^4 B.$$

Cette condition est généralement satisfaite aux contraintes où les fautes s'élargissent, puisque nous avons montré que dans ce cas $l_F < \mu B^2/12\gamma$.

Notre analyse prévoit donc une multiplication rapide des fautes d'empilement dès que la largeur L de ces fautes est suffisante :

$$h/b \simeq l_F/2b \simeq \beta(L/l_F)^{1/2}$$

ou $$L \simeq \frac{l_F^3}{\beta^2 B^2} \simeq \frac{1}{10}\,\frac{l_F^3}{B^2} \qquad \text{(III.27)}$$

Dans le cas du cuivre par exemple cette taille critique est de l'ordre de $10^5 B \simeq 10^{-3}$ cm. On peut sans doute ainsi rendre compte d'une partie des crochets de traction observés sur des échantillons dont la taille était bien supérieure à cette largeur[25] (figure 29).

Ce processus de multiplication des fautes généralise donc le mécanisme de pôle de Cottrell et Bilby[37] au cas des cristaux cubiques à faces centrées fortement écrouis bien qu'il ne conduise pas forcément à un maclage régulier avec passage d'une faute d'empilement tous les plans. Le problème de l'épaississement des lamelles maclées dans un cristal écroui sera étudié au chapitre suivant.

On peut également noter qu'une analyse analogue doit s'appliquer au développement des fautes d'empilement quand la force appliquée est d'origine thermodynamique comme dans la transformation martensitique[38] du Cobalt CFC $\rightleftarrows$ HC.

Finalement nous indiquerons qu'un mécanisme analogue[26] doit permettre de former une partie des dipôles de dislocations <u>parfaites</u> observés au début de la déformation de la plupart des métaux et des cristaux ioniques[39].

CHAPITRE IV

FORMATION ET PROPAGATION DES MACLES MECANIQUES

Nous étudierons dans ce chapitre certains aspects liés à la propagation des macles mécaniques.

Il est facile de montrer[40] que le maclage comme le glissement ne peut pas se développer subitement dans toute une partie d'un cristal et qu'il correspond nécessairement à un phénomène propagé à l'aide de dislocations. Dans les structures les plus simples (C.C, H.C, C.F.C) ces dislocations de macle sont identiques aux dislocations de Shockley d'une dislocation parfaite dissociée. On conçoit alors le maclage mécanique comme la propagation d'une faute d'empilement sur des plans successifs par un mécanisme de pôle qui permet aux dislocations de Shockley de passer d'un plan à l'autre. Le pôle le plus simple[37] est évidemment fourni par une dislocation vis qui perce le plan de faute et dont le vecteur de Burgers est égal à la distance entre plans. En effet une telle dislocation réunit les différents plans parallèles en une seule surface hélicoïdale qui peut être balayée par une seule dislocation de Shockley. Ce mécanisme "idéal" se heurte toutefois à plusieurs difficultés : la première faute d'empilement est limitée par deux partielles, si on veut engendrer une macle par le mécanisme de pôle ces deux partielles passent nécessairement l'une au dessus de l'autre, leur énergie d'interaction est alors très élevée et le mécanisme est probablement stoppé. De plus les macles mécaniques ne se développent généralement que sous fortes contraintes lorsque le réseau de dislocations produit par l'écrouissage est déjà assez dense. Dans ces conditions nous avons vu précédemment que la propagation d'une faute isolée ressemblait assez peu à sa propagation dans un cristal parfait : il doit en être de même pour les macles. La façon de résoudre ces difficultés dépend un peu de la structure du cristal étudié. Pour fixer

les idées, nous nous contenterons d'étudier la propagation des macles dans les métaux cubiques à faces centrées. En effet bien que les macles de recristallisation soient fréquentes dans cette structure on a longtemps pensé que le maclage mécanique y était impossible[37] pour des raisons géométriques. En fait, on sait maintenant que le maclage est un mode de déformation mécanique assez général[25] à basse température pour les métaux et alliages cubiques à faces centrées.

I. NUCLEATION D'UNE MACLE DANS UN CRISTAL PARFAIT C.F.C.

Nous étudierons tout d'abord un modèle de nucléation de macle dans un cristal autrement parfait. Nous verrons ultérieurement l'influence du réseau de dislocations généralement créé par l'écrouissage préalable à l'apparition des macles.

Si (a) est le plan de macle (figure 12) on peut à priori envisager deux types de dissociations pour engendrer la première faute d'empilement soit :

$$\overrightarrow{AC} \rightarrow \overrightarrow{A\alpha} + \overrightarrow{\alpha C} \qquad \text{(IV.1)}$$

$$\text{et} \quad \overrightarrow{BC} \rightarrow \overrightarrow{B\alpha} + \overrightarrow{\alpha C} \qquad \text{(IV.2)}$$

Dans la réaction (IV.2) les deux dislocations de Shockley sont glissiles dans le plan (a), on peut cependant imaginer leur séparation à l'aide d'une contrainte convenablement orientée créant ainsi la première faute d'empilement (chapitre III). Si on veut transformer cette faute en macle il faut faire passer ces deux dislocations l'une au dessus de l'autre, ce qui demande une contrainte σ telle que :

$$\sigma b \simeq \frac{\mu \overrightarrow{B\alpha} . \overrightarrow{\alpha C}}{2\pi Kd} \simeq \frac{\mu B^2}{12\pi Kd} \simeq \frac{\mu B}{20}$$

au moins dix fois plus élevée que la contrainte appliquée.

Par contre dans la réaction (IV.1) les deux dislocations interagissent peu, leur vecteurs de Burgers $\overrightarrow{A\alpha}$ et $\overrightarrow{\alpha C}$ étant perpendiculaires. Comme d'autre part les composantes de $\overrightarrow{A\alpha}$ et $\overrightarrow{\alpha C}$ perpendiculairement au plan (a) sont égales à l'équidistance des plans {111} il semble que ces dislocations fournissent un pôle convenable pour le maclage des C.F.C.. Cottrell et Bilby[37] ont toutefois montré qu'il n'était pas possible de dépasser ainsi le stade de la première faute d'empilement sous peine de produire un défaut d'empilement du type ...ABCA/ABC... . En effet la dislocation de Shockley $\overrightarrow{\alpha B}$ doit rencontrer $\overrightarrow{A\alpha}$ pour reformer $\overrightarrow{AB}$ après avoir fait un tour complet autour du pôle et engendré une faute

infinie sur un plan (a). Comme l'a noté Venables[25] le fonctionnement ultérieur de la source nécessite un glissement prismatique de la dislocation recombinée $\overrightarrow{AB}$ d'un vecteur de Burgers sur le plan (b) de façon à ce que la dissociation (IV.1) se produise maintenant sur le plan (a) adjacent au premier. La nécessité d'un tel glissement prismatique à chaque rotation autour du pôle montre la difficulté d'un mécanisme de pôle dans les C.F.C..

Supposons par contre qu'il existe une faute d'empilement intrinsèque isolée et élargie sur un plan (a). Cette faute agit comme un obstacle pour la propagation des dislocations sur les autres plans (111) ((b),(c),(d)). Soit $\overrightarrow{DC}$ une dislocation dissociée dans le plan (b) suivant la réaction (figure 22bis a) :

$$\overrightarrow{DC} \rightarrow \overrightarrow{D\beta} + \overrightarrow{\beta C}$$

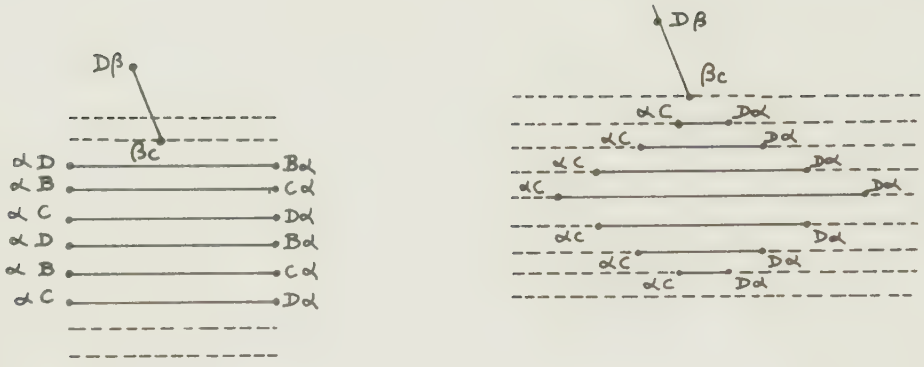
Poussée par la contrainte contre la faute initiale cette dislocation se met en position vis, elle peut donc dévier dans le plan adjacent au plan de faute suivant la réaction (figure 22bis b) :

$$\overrightarrow{\beta C} \rightarrow \overrightarrow{\beta\alpha} + \overrightarrow{\alpha C} \qquad \text{(IV.3)}$$

mais la stair-rod $\overrightarrow{\beta\alpha}$ attire la dislocation restante $\overrightarrow{D\beta}$ pour donner $\overrightarrow{D\alpha}$ dans le plan de faute.

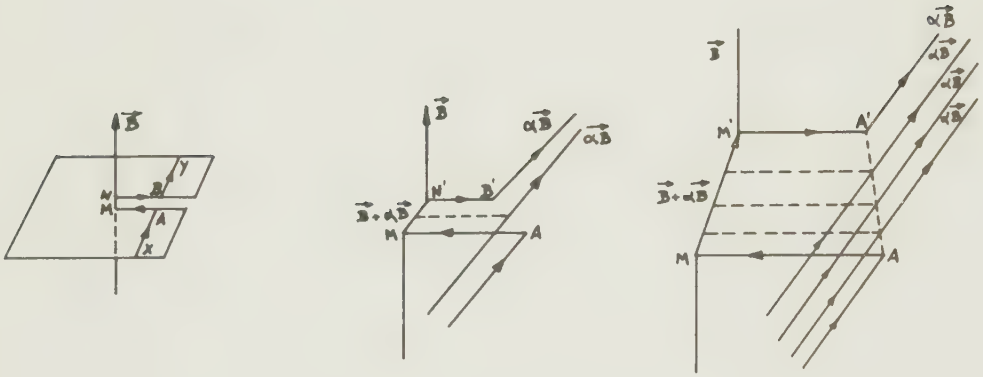
Les deux dislocations de Shockley $\overrightarrow{D\alpha}$ et $\overrightarrow{\alpha C}$ sont glissiles dans un plan adjacent au plan de la faute initiale, elles se repoussent et limitent maintenant une faute extrinsèque. Si les énergies des fautes extrinsèque et intrinsèque sont voisines[41] la répulsion des deux partielles $\overrightarrow{D\alpha}$ et $\overrightarrow{\alpha C}$ n'est pratiquement pas limitée et on obtient ainsi une lamelle "maclée" d'épaisseur $2d_{111} = 2\sqrt{2}B/\sqrt{3}$. Le mécanisme peut évidemment se répéter pour une autre dislocation $\overrightarrow{DC}$ permettant ainsi la croissance de la lamelle maclée "nettoyant" petit à petit le cristal de ses dislocations $\overrightarrow{DC}$.

On voit donc qu'il est facile d'obtenir des macles mécaniques dès l'instant où on dispose de fautes d'empilement assez larges et quand les fautes d'empilement intrinsèque et extrinsè-



(a) de recristallisation (b) mécanique

Fig. 23 - Joint de macle



(a) (b) (c)

Fig. 24 - Développement d'un dipôle associé à un arbre, par épaississement d'une lamelle de macle.

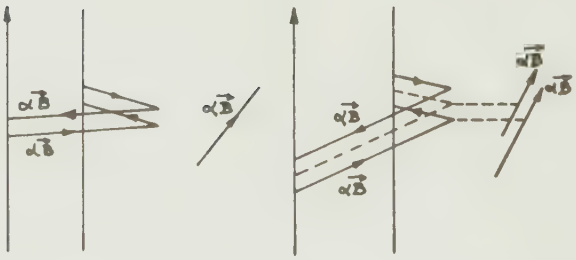


Fig. 25 - Traversée de deux **arbres de signes** opposés par une macle.

que ont des énergies voisines. La première condition est vraisemblablement vérifiée[26], la seconde semble plus restrictive, toutefois des observations récentes[41] montrent bien que les deux fautes ont des énergies pratiquement égales dans des alliages de faible énergie de faute (Ag-In). De toute façon le mécanisme devient actif dès que la lamelle maclée a atteint une épaisseur de quelques distances entre plans (111).

On peut tout aussi bien que $\overrightarrow{DC}$(b) utiliser les dislocations $\overrightarrow{CB}$(b) et $\overrightarrow{BD}$(c) si celles-ci sont mobiles. En effet le vecteur de macle $\overrightarrow{\alpha C}$ n'est défini qu'à une dislocation parfaite près et les dislocations de vecteurs de Burgers $\overrightarrow{\alpha B}$ ($\overrightarrow{\alpha C}$ + $\overrightarrow{CB}$) et $\overrightarrow{\alpha D}$ ($\overrightarrow{\alpha C}$ + $\overrightarrow{CD}$) définissent la même faute d'empilement. En utilisant alternativement les dislocations $\overrightarrow{DC}$(b), $\overrightarrow{CB}$(d) et $\overrightarrow{BD}$(c) on obtient la macle de la figure 23a. Les dislocations qui sont en tête de macle ont alors un vecteur de Burgers moyen nul : elles ne produisent pas de contraintes à grandes distances et le joint de macle doit être assez plat jusqu'à son extrémité. C'est probablement le cas des macles de recristallisation, par opposition aux macles mécaniques où la contrainte appliquée favorise un seul glissement secondaire (par exemple $\overrightarrow{DC}$(b)) fournissant des joints de macle plus arrondis (figure 23b). La situation schématisée figure 23a pour la macle de recristallisation est assez idéale, elle produit une relaxation complète des contraintes en tête de macle. Il faut bien entendu s'attendre à une situation intermédiaire où la relaxation n'est que partielle, l'arrivée des dislocations $\overrightarrow{DC}$(b), $\overrightarrow{CB}$(b) et $\overrightarrow{BD}$(c) se faisant plus ou moins au hasard.

II. PROPAGATION D'UNE MACLE DANS UN CRISTAL ECROUI.

Les macles ne peuvent se développer que pour des contraintes élevées (fin du stade II, pour le cuivre par exemple $\sigma \sim \mu/300$). Nous supposerons comme au chapitre III que l'écrouissage a produit un réseau tridimensionnel assez uniforme de dislocations parfaites dont la longueur moyenne sera dénotée par l_F. Les dislocations parfaites étant décrites à l'aide du tétraèdre de Thompson ABCD (figure 12), les dislocations du cristal maclé peuvent se décrire à l'aide du tétraèdre A'BCD symétrique du précédent par rapport au plan de macle (a). Nous noterons par b la longueur du vecteur de Burgers de la dislocation de macle.

Commençons par étudier le cas d'un seul arbre (dislocation coupant le plan de macle (a)). Lors de la propagation de la première faute d'empilement le passage d'un arbre dont le vecteur de Burgers n'est pas dans le plan de faute s'accompagne de la formation du dipôle AM-BN attaché à l'arbre (chapitre III). Ce dipôle est constitué par des dislocations de Shockley (figure 24a). L'arbre lui-même prend un cran MN dont nous avons donné les caractéristiques au chapitre III. Quand on propage une seconde dislocation de Shockley sur un plan (a) adjacent au précédent, on crée un second dipôle A'M'-B'N' dont la partie A'M' annihile la partie BN du premier dipôle. La partie X'A' de la seconde dislocation prolonge alors la partie BY de la première. Le cran MN a mintenant une hauteur double soit MN' (figure 24b). En répétant l'opération, on obtient la description d'une lamelle de macle traversée par un arbre à caractère vis (figure 24c). Les caractéristiques de l'arbre dans la partie maclée sont celles du cran MN pris par l'arbre dans la propagation de la première faute d'empilement. L'arbre "maclé" change de vecteur de Burgers et de plan de glissement, la différence entre les vecteurs de Burgers se retrouvant sur les dislocations de Shockley (ou dislocations de macle) MA et M'A' issues des points d'intersection de l'arbre et des joints de macle.

Généralement la macle traverse évidemment un grand nombre d'arbres. Lors de la propagation de la première faute les dipôles ainsi formés convergent en rivières. Il faut maintenant étudier le comportement de ces rivières lors de la propagation de la seconde dislocation de Shockley. Etudions le cas de deux arbres. Quand les deux arbres sont de signes opposés la géométrie est très simple : les dipôles se compensent en coalesçant (figure 25a). Les deux arbres sont alors joints par un dipôle dont la hauteur croît au fur et à mesure que la macle s'épaissit (figure 25b). Par contre, quand les deux arbres sont de même signe, les dipôles en coalesçant doivent former un dipôle de hauteur double. La propagation de deux dislocations de Shockley sur deux plans voisins donne alors en principe la configuration compliquée représentée figures 26a et b. En fait cette configuration n'est pas stable et les dipôles AB-EF et A'B'-E'F' vont se séparer. En effet, si $\tau_d(b,h)$ est la tension de ligne d'un dipôle de hauteur h et de vecteur de Burgers b, l'énergie du dipôle représenté figure 26b, proportionnelle à $\tau_d(2b,2h) = 4\tau_d(b,2h)$ est égale au double de l'énergie des dipôles séparés proportionnelle à $2\tau_d(b,2h)$.

Chaque dipôle créé a un arbre de signe donné aboutit alors à un arbre de signe opposé ; il est en effet repoussé par les dipôles attachés aux arbres du même signe que celui dont il est issu. On voit donc que, au fur et à mesure de sa propagation, la seconde dislocation de Shockley défait les rivières créées lors de la propagation de la première. Il ne reste plus finalement que des dipôles joignant des arbres de signes opposés et dont la hauteur est égale au double de la hauteur entre plans (a) adjacents.

La propagation d'autres dislocations de Shockley sur les plans suivants élargit peu à peu ces dipôles. Sous l'effet de la contrainte appliquée σ_a, les dislocations de Shockley qui constituent un dipôle finiront par se séparer quand la lamelle maclée atteint une hauteur h suffisante et telle que :

$$\frac{\mu b}{2\pi h} \simeq \sigma_a \simeq \frac{\mu B}{4 l_F} \qquad \text{(IV.4)}$$

Au dela de cette épaisseur critique de la micromacle, typiquement de l'ordre de quelques 10B aux contraintes élevées qui produisent le maclage, les dislocations de Shockley obtenues sur l'un des deux joints d'une lamelle maclée sont indépendantes des dislocations de Shockley situées sur l'autre joint. On obtient ainsi sur chaque joint un certain nombre de dislocations de Shockley dont nous allons maintenant préciser la répartition.

III. CONSTITUTION DES JOINTS DE MACLE.

L'étude précédente montre qu'on doit associer des dislocations de macle à chaque intersection d'un arbre à caractère vis avec un joint de macle ; ces dislocations joignent des arbres de signes opposés. Nous montrerons que, même en l'absence de toute relaxation plastique, cette distribution de segments de dislocations de macle n'est pas uniforme. En fait, elle est de moins en moins uniforme au fur et à mesure qu'on se rapproche des extrémités de la lamelle maclée, où les dislocations de macle joignent des arbres assez éloignés, constituant alors de véritables empilements qui fournissent la courbure nécessaire des joints. Par contre, elle doit être assez uniforme au centre du joint de macle, où on trouve des segments assez courts et des deux signes, le joint ayant alors sa forme la plus plate. Le comportement à attendre ainsi sur un joint d'une lamelle maclée d'allure générale circulaire est schématisé figure 27. Les relaxations des contraintes en tête de macle modifient ces conclusions et nous traiterons séparément les deux cas.

III.1. Joint non relaxé.

Au centre du joint, dans la zone où il est assez plat, les segments de dislocation de Shockley de signes opposés doivent être en nombres égaux, de façon que le joint de macle soit en moyenne parallèle au plan d'accolement cristallographique. Ces segments doivent avoir une longueur moyenne de l'ordre de la distance moyenne l_F entre arbres perçant le joint (la taille moyenne serait $\sqrt{3/2}\ l_F$ dans les métaux C.F.C., où 2 arbres sur 3 ont un caractère vis). Si en effet leur distance était nettement supérieure à l_F, l'application d'une faible contrainte les courberaient suffisamment pour les faire réagir avec d'autres arbres des deux signes qui réduiraient rapidement leur longueurs.

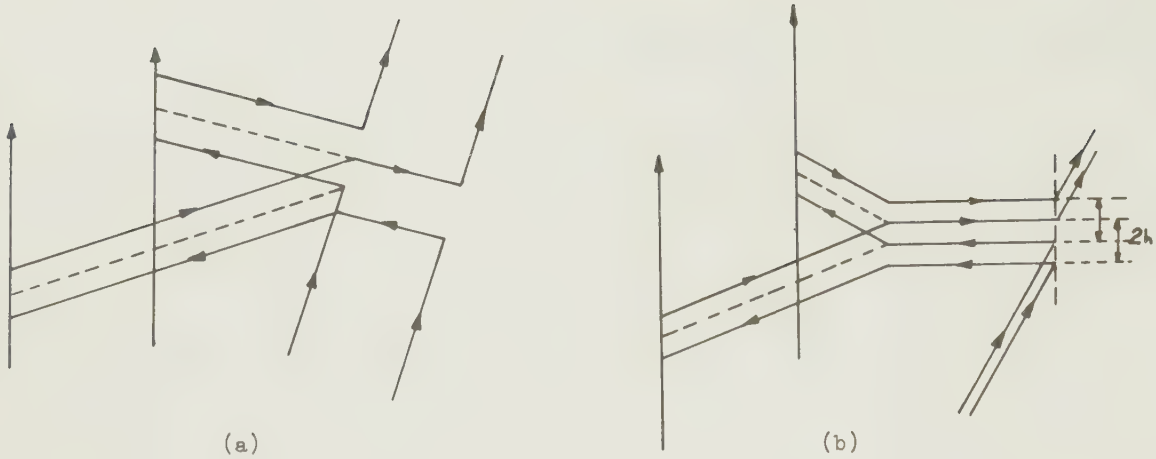


Fig. 26 - Traversée de deux arbres de même signe.

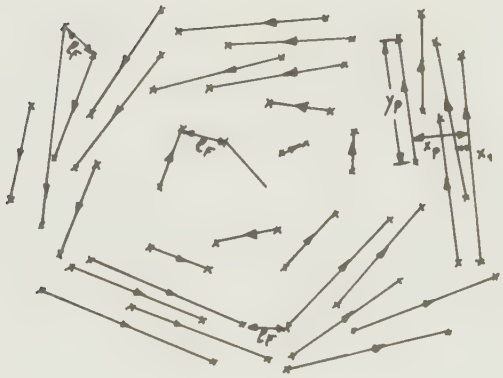


Fig. 27 - Répartition schématique des segments de dislocations de Shockley sur un joint d'une lamelle maclée d'allure circulaire.

Fig. 28 - Sources de maclage au centre d'un joint.

Quand on s'éloigne du centre du joint pour se rapprocher du bord de la lamelle maclée, le joint se courbe en déviant de plus en plus de la position parallèle au plan d'accolement cristallographique. Il doit donc contenir en moyenne de plus en plus de dislocations d'un signe déterminé. Quand l'écartement entre ces dislocations est bien inférieur à l_F, on peut admettre que seuls subsistent des segments de dislocations d'un signe. Si en effet un segment de signe opposé subsistait, l'application d'une faible contrainte l'amènerait immédiatement à rencontrer dans sa courbure des segments du signe majoritaire avec lesquels il s'annihilerait. L'empilement des dislocations de macle en bord de lamelle doit alors être réalisé par un empilement de segments de dislocations, tous de même signe. Quand on approche du bord de la lamelle les segments doivent être de plus en plus serrés ; comme leur densité est une constante pour un réseau de taille l_F donnée, ils sont de plus en plus longs.

Plus précisément, on sait que la distance x_p entre la $p^{ème}$ dislocation et la première située au bord de la lamelle vaut approximativement[12] :

$$x_p \simeq \frac{np}{n-p} x_1 \qquad \text{avec} \quad nx_1 \simeq \frac{\mu b}{4\sigma_a}$$

n étant le nombre de dislocations dans l'empi ement qui est ici proportionnel à l'épaisseur de la lamelle maclée. La distance X_p entre la $p^{ème}$ dislocation et la $(p-1)^{ème}$ peut alors s'écrire, près de l'extrêmité de la lamelle :

$$X_p = x_p - x_{p-1} \simeq \left[\frac{np}{n-p} - \frac{n(p-1)}{n-p+1}\right] x_1 \simeq \frac{nx_1}{n-p} \qquad \text{(IV.5)}$$

Si nous appelons y_p la longueur du $p^{ème}$ segment d'un de ces empilements (figure 27), le produit $X_p y_p$ doit être égal en moyenne à l'aire associée à deux arbres soit :

$$X_p y_p \simeq 2l_F^2$$

d'où :

$$y_p \simeq 2l_F^2(n - p)\frac{4\sigma_a}{\mu b} \qquad (IV.6)$$

On en déduit en particulier $y_o \simeq ny_{n-1}$, c'est-à-dire que les traces sont n fois plus longues au bord de la lamelle qu'au centre des joints. Bien entendu ce dernier résultat est à prendre comme un ordre de grandeur assez grossier puisque les formules utilisées ne sont qu'approximativement valables au centre d'une lamelle.

III.2. Joint relaxé.

L'analyse précédente suppose que la lamelle maclée s'est développée à travers un réseau dont la taille est fixée rigidement, par exemple par un blocage efficace dû aux impuretés (Fer, Calcite, ...). Ceci ne sera pas le cas usuel des métaux cubiques à faces centrées fortement écrouis. Dans un tel cas on doit s'attendre à ce que les portions du réseau voisines de l'extrémité de la lamelle de macle agissent comme des sources de glissement secondaire pour relacher les contraintes dues aux empilements de dislocations de macle au bord de la lamelle.

L'effet de cette relaxation est double :

1. Les contraintes dues aux dislocations secondaires compenseront dans une large mesure les contraintes à grandes distances des empilements.

2. Celles des dislocations secondaires qui percent le joint de macle avec un caractère vis agissent comme des arbres qui réduisent la taille moyenne des segments de dislocation de macle.

Pour que la relaxation à grande distance soit efficace, la densité locale de ces arbres doit être telle que les empilements soient à peut près détruits. C'est ce qui se produit quand la nouvelle longueur y'_p des segments de dislocations de macle au

bout de la lamelle maclée, après relaxation, est du même ordre de grandeur que la distance X_p (figure 27) entre ces segments avant la relaxation. La configuration en tête de lamelle maclée est alors assez analogue à celle que l'on obtient au centre des joints de macle, les segments de dislocations de Shockley joignant en fait les arbres les plus proches. Naturellement la densité locale ' de ces arbres est bien supérieure à la densité $\rho \simeq l_F^{-2}$ des arbres dans la région qui n'est pas affectée par la relaxation plastique. Plus précisément, compte tenu des résultats précédents, on a, près du bord de la lamelle :

$$\rho' \simeq \frac{1}{x_p^2} \simeq \frac{\rho^2 y_p^2}{4} \simeq \frac{(n-p)^2}{4 l_F^2}$$

soit :

$$\frac{\rho'}{\rho} \simeq \frac{y_p}{y'_p} \simeq \frac{(n-p)^2}{4} \qquad \text{(IV.7)}$$

La relaxation raccourcit donc les longs segments de dislocations de Shockley, en bord de lamelle jusqu'à des tailles comparables à leur distance moyenne, de l'ordre de l_F/n en tête de macle.

Cette relaxation des empilements en tête de macle doit rendre les joints de macle plus plats et parallèles au plan d'accolement sauf en tête de macle. Comme dans le cas du clivage[34], les boucles de relaxation distribuées au hasard doivent alors donner au joint un rayon de courbure assez uniforme et de l'ordre de h/2.

IV. CONTRAINTES NECESSAIRES A L'EPAISSISSEMENT DES LAMELLES MACLEES.

IV.1. Joints non relaxés.

Sous l'action d'une contrainte appliquée, les segments de dislocations de Shockley, situés dans le joint de macle, doivent se courber jusqu'à réagir avec d'autres arbres pour donner de nouveaux segments (figure 28). Vers le centre de la lamelle, ces redistributions de segments se font un peu dans tous les sens puisque les segments initiaux ont des signes répartis de façon aléatoire. Quand on se rapproche du bord, le mouvement des segments doit conduire à l'augmentation des empilements si la contrainte appliquée est dirigée dans un sens favorable au déplacement de la macle.

Par rapport au développement dans un cristal parfait d'une lamelle maclée, il y a deux différences :

1. Par de problème de nucléation des dislocations de macle dès que la macle dépasse une épaisseur de quelques 10B d'après IV.2.

2. Existence d'un frottement solide qui s'oppose au déplacement des parois dans les deux sens.

Ce frottement s'oppose au développement de la lamelle ; il permet à une lamelle une fois formée, de subsister en l'absence de contrainte appliquée. Comme pour tout autre frottement, son rôle est surtout important dans la zone au centre de la lamelle, loin des bords.

L'épaississement des lamelles maclées se fait par activation des sources de Frank et Read constituées par les segments de dislocations de Shockley situées au centre des joins de macle. La contrainte nécessaire à l'activation de ces sources de longueur βl_F peut se mettre sous la forme :

$$\sigma_1 = \frac{\mu b}{\beta l_F} \qquad \text{(IV.8)}$$

On suppose dans cette estimation que les points d'ancrage des sources sont fixes. En fait ils sont mobiles dans le plan de macle. On peut toutefois montrer[42] que la mobilité des noeuds modifie peu σ_1 tant que $\beta > 1$ ce qui est toujours vérifié ($\beta \simeq \sqrt{3/2}$ dans un C.F.C.). Une deuxième difficulté vient de ce qu'une source peut en rencontrer une autre de signe opposé avant d'arriver en position critique. es deux facteurs précédents conduisent à un renforcement du paramètre β. On peut conclure[42] que β est du même ordre de grandeur que le coefficient α' ($\simeq 4$) relatif au frottement $\mu b/\alpha' l_F$ à la propagation d'une faute d'empilement isolée.

En conclusion, la production d'une macle de taille L et d'épaisseur h demande dans ce cas une contrainte :

$$\sigma \simeq \sigma_1 + \frac{\mu h}{2L} \simeq \frac{\mu b}{\alpha' l_F} + \frac{\mu h}{2L} \qquad (\alpha' \simeq 4) \qquad \text{(IV.9)}$$

Inversement cette lamelle de macle, une fois formée, subsiste, quand on relache la contrainte appliquée, avec une épaisseur maxima :

$$h \simeq \frac{2\sigma_1 L}{\mu} \simeq \frac{2BL}{\beta l_F} \simeq \frac{BL}{l_F} \qquad \text{(IV.10)}$$

Par exemple pour le cuivre, aux contraintes élevées où on observe le maclage mécanique $\sigma_1 \simeq \mu/200$, $l_F \simeq 100B$ et $h \simeq 10^{-2}L$. Mais le cas considéré ici s'appliquerait plutôt au cas d'un métal durci après écrouissage par une précipitation d'impuretés sur les dislocations du réseau de Frank (Fe C, Calcite).

IV.2. Joints relaxés.

En fait dans les métaux purs cubiques à faces centrées, la relaxation plastique des empilements se produit automatiquement

dès que la contrainte appliquée exercée par ces empilements sur des sources secondaires distantes de l_F dépasse la limite élastique de ces métaux, de l'ordre de $\mu B/4l_F$ pour une structure C.F.C.[33], soit :

$$\frac{n\mu b}{2\sqrt{Ll_F}} \gtrsim \frac{\mu b}{4l_F}$$

On constate ainsi que ces empilements sont relaxés dès que $n > \frac{1}{2}\sqrt{\frac{L}{l_F}}$ soit :

$$\frac{h}{B} \simeq \frac{L}{l_F} > \frac{1}{2}\sqrt{\frac{L}{l_F}}$$

ce qui est évidemment toujours vérifié.

En supprimant la contrainte de retour $\mu h/2L$ des empilements, cette relaxation a un double effet :

1. Elle permet à des lamelles maclées de forte épaisseur h de se former dès que la contrainte appliquée dépasse la contrainte de frottement σ_1. Comme dans le modèle détaillé en I la contrainte de <u>nucléation</u> d'une macle est la contrainte $\gamma/b + \mu b/\alpha' l_F$ pour créer la première faute d'empilement, on voit que la contrainte $\sigma_1 \simeq \mu b/\alpha' l_F$ pour épaissir cette macle est plus petite de γ/b. Ceci explique bien les forts crochets de traction généralement observés[25] après maclage.

2. Les lamelles épaisses, une fois formées, subsistent pratiquement inchangées quand la contrainte appliquée est relâchée, c'est bien ce qu'on observe[25] même pour des macles qui ne traversent pas tout le cristal.

V. CONCLUSIONS.

Dans cette étude, nous nous sommes limités à la géométrie des métaux cubiques à faces centrées mais certains aspects semblent pouvoir se généraliser à d'autres structures.

Dans les cubiques centrés, la situation est assez analogue aux cubiques à faces centrées si on développe le maclage à basse température après avoir produit un réseau de Frank de forte densité par déformation plastique à plus haute température. Les dislocations du réseau sont alors bloquées assez fortement[46], et les phénomènes de relaxation plastique doivent être peu marqués. Remarquons également que le mécanisme proposé en I et schématisé figure 23a pour un joint de macle de recristallisation ressemble aux mécanismes de relaxation des joints imaginés par Sleeswyk[47] pour les cubiques centrés.

Dans les hexagonaux la macle $(10\bar{1}2)[101\bar{1}]$ est la plus fréquemment obtenue par déformation mécanique[40]. L'analyse précédente semble donc pouvoir s'appliquer à la propagation d'une telle macle, les dislocations du plan de base constituant une forêt pour cette propagation. C'est ainsi par exemple que Thompson et Millard[43] décrivent la propagation d'une macle dans un hexagonal : un arbre c de vecteur de Burgers $[000\bar{1}]$ de la matrice entre dans la macle suivant deux dislocations a basales du cristal maclé en laissant sur le joint une dislocation de macle issue du point d'intersection de l'arbre et du joint. Le mécanisme inverse où deux dislocations a de la matrice rentrent dans la macle sous forme de dislocation c' est également possible. Il semble bien en effet que la densité de dislocations c' soit importante dans les macles du Beryllium alors que de telles dislocations sont pratiquement inexistantes dans la matrice[44]. L'influence de la forêt semble cependant moins nette que dans les cubiques à faces centrées car dans les hexagonaux, la forêt, localisée sur les plans de base, doit être assez mobile. Dans ces conditions,

il n'est pas sûr qu'elle ne soit pas repoussée par la macle au cours de sa propagation. C'est ce qu'on observe dans des lames minces de zinc où la densité de dislocations est très faible[45]. De toute façon, le mécanisme proposé ici ne peut jouer que pour des forêts assez denses.

CONCLUSION

Dans une première partie nous avons utilisé une méthode de sommation par plans pour étudier systématiquement les fautes d'empilement à priori possibles sur les plans atomiques les plus denses des halogénures d'alcalins du type Chlorure de Sodium. La faute la plus étudiée est aussi celle qui semble la plus vraisemblable puisqu'elle se produit sur les plans de glissement (110). Cette faute n'est pas métastable, c'est dire qu'il ne faut pas s'attendre à observer des fautes d'empilement qui s'étendraient à tout le cristal. Par contre une bande de faute d'empilement de largeur finie résultant d'une dissociation de dislocation parfaite en dislocations partielles peut être stabilisée par la répulsion des partielles. Les largeurs des dissociations obtenues semblent suffisantes pour expliquer les plans de glissement observés. Une telle dissociation permet également de comprendre certaines analogies des propriétés plastiques du Chlorure de Sodium et des métaux cubiques à faces centrées : formation de barrières sessiles et glissements déviés activés thermiquement.

Dans une deuxième partie nous avons généralisé cette méthode au calcul de l'énergie de paroi de ferroélectriques du type Titanate de Baryum. On obtient une énergie de paroi à 180° dans la phase tétragonale du Titanate de 32 ergs cm^{-2} dont le tiers seulement est dû aux interactions dipôlaires. Compte tenu des approximations utilisées (détermination des moments dipôlaires et des potentiels répulsifs d'échange entre ions, modèle de la paroi, ...), cette énergie doit être prise comme un ordre de grandeur qui montre toutefois l'importance des termes d'échange, jusqu'ici négligés dans une étude microscopique.

Dans une troisième partie nous avons étudié les conditions de développement des fautes d'empilement à travers le réseau de Frank d'un métal cubique à faces centrées écroui. On a

déterminé une force de frottement essentiellement due à la traversée des arbres attractifs, proportionnelle à la racine carrée de la densité du réseau et suffisante pour stabiliser la faute, une fois celle-ci formée. Nous avons montré que les dipôles créés à la traversée des arbres doivent empêcher la formation de défauts ponctuels lors de la déformation ; ils doivent se réunir peu à peu en plus grands dipôles et permettre finalement la multiplication du défaut d'empilement quand celui-ci a pris une extension suffisante.

Finalement on a généralisé l'étude précédente à la nucléation et au développement des macles mécaniques dans les métaux cubiques à faces centrées. Cette nucléation semble devoir suivre celle des fautes d'empilement et être d'autant plus facile que les fautes extrinsèque et intrinsèque ont des énergies plus voisines. Dans tous les cas l'épaississement des lamelles maclées se produit pour des contraintes inférieures aux contraintes de nucléation, ce qui semble bien expliquer les forts crochets de traction qui suivent généralement l'apparition du maclage.

BIBLIOGRAPHIE

(1) MADELUNG E. (1918) Physik.Z. 19, 54

(2) MADELUNG E. (1919) Physik.Z. 20, 494
VERWEY E.J.W. (1946) Rev.Trav.Chim. 65, 521
SHUTTLEWORTH R. (1949) Proc.Phys.Soc. (Londres) A62, 167
BENSON G.C. (1961) J.Chem.Phys. 35, 2113

(3) BLANDIN A., FRIEDEL J. et SAADA G. (196) Journal de Physique. Colloque C.3

(4) BORN M. et HUANG K. Dynamical theory of crystal lattices (1954) Oxford University Press (Londres)
HUGGINS M.L. et MAYER J.E. (1933) J.Chem.Phys. 1, 643

(5) TOSI M.P. (1964) Solid.Stat.Phys. 16, 107

(6) HEIDENREICH R.D. et SHOCKLEY W. (1948) Bristol conference, Phys.Soc. Londres

(7) RASCHINGER W.A. et COTTRELL A.H. (1956) Acta.Met. 4, 209

(8) THOMAS G. (1963) J.Aust.Inst. of metals, 8, 80
HOWIE A. et SWANN P.R. (1961) Phil.Mag. 6, 1215

(9) ESHELBY J.D., W.T.READ et W.SHOCKLEY (1953) Acta Met. 1, 251-359
READ W.T. (1953) Dislocations in crystals Mc Graw-Hill N.Y.
STROH A.N. (1958) Phil.Mag. 3, 625

(10) HUNTINGTON H.B. (1958) Solid Stat.Phys. 7, 286

(11) KROENER E. (1958) Kontinuum theorie der Versetzungen, Springer, Berlin
NYE J.F. (1953) Acta Met. 1, 153

(12) FRIEDEL J. (1964) Dislocations, Pergamon

(13) HUNTINGTON H.B., DICKEY J.E. et THOMSON R. (1955) Phys.Rev. 100, 1117
GILMAN J.J. (1959) Acta Met. 7, 608
BUERGER M.J. (1930) Amer.Min. 15, 21, 35

(13a) ALDEN T.H. (1963) Acta Met. 11, 1103
MENDELSON S. (1962) JAP. 33, 2175 et 2182
WASHBURN J. et HOOVER D.B. (1962) JAP. 33, 11

(13b) DAVIDGE R.W. et PRATT P.L. (1964) Phys.Stat.Sol. 6, 759
SCHMITTEN W. in der et HAASEN P. (1961) JAP. 32, 1780
HAASEN P. et HESSE J. (1963) The relation between the structure and mechanical properties of metals. Her majesty's Stationnery office, Londres, p.138
HESSE J. (1965) Phys.Stat.Sol. 9, 209

(13c) CAGNON M. (1966) Comptes rendus du Xème colloque de métallurgie C.E.N. Saclay, p.79

(14) FONTAINE G. (1967) J.Phys.Chem.Sol. 28, 2553

(15) FONTAINE G. (1967) J.Phys.Chem.Sol. 28, 2199

(16) JONA F. et SHIRANE G. (1962) Ferroelectric crystals. Pergamon. Oxford
KÄNZIG W. (1957) Solid Stat.Phys. 4, 1.

(17) FRAZER B.C., DANNER H.P. et PEPINSKY P. (1955) Phys.Rev. 100, 745

(18) SLATER J.C. (1950) Phys.Rev. 78, 748

(19) PAULING L. (1948) The nature of the chemical bond, Cornell U.P. N.Y.

(20) ZHIRNOV V.A. (1959) Soviet physic. JETP. 35, 822

(21) KINASE W. et KAKAHASI H. (1957) J.Phys.Soc.Japan 12, 464

(22) FUMI F.G. et TOSI M.P. (1960) J.Chem.Phys. 33, 1

(23) BERLINCOURT D. et JAFFE H. (1958) Phys.Rev. 111, 143

(24) MERZ W.J. (1954) Phys.Rev. 95, 690
HOOTON J.A. et MERZ W.J. (1955) Phys.Rev. 98, 409
KITTEL C. (1949) Rev.Modern.Phys. 21, 565

(25) BLEWITT T.H., COLTMAN R.R. et REDMAN J.K. (1954) Bristol Conference Phys.Soc. Londres
(1957) J.Appl.Phys. 28, 651
SUZUKI H. et BARRET G.S. (1958) Acta Met. 6, 156
HAASEN P. (1958) Phil.Mag. 3, 384
VENABLES J.A. (1961) Phil.Mag. 6, 379
(1964) J.Phys.Chem.Sol. 25, 685-693
HAASEN P. et KING A. (1960) Z.Metallk, 51, 722
THORNTON P.R. et MITCHELL T.E. (1962) Phil.Mag. 7, 361

(26) FONTAINE G. (1966) J.Phys. 27, 201-323 - C-3, 151
ESCAIG B., FONTAINE G. et FRIEDEL J. (1967) Can.J.of Phys. 45, 481

(27) SWANN P.R. (1963) Electron microscopy and strength of crystals, p.131, Interscience

(28) THOMPSON N. (1953) Proc.Phys.Soc. B. 66, 481

(29) HOWIE A. et VALDRE V. (1963) Phil.Mag. 8, 1981

(30) SEEGER A., MADER S. et KRONMÜLLER H. (1963) Electron microscopy and strength of crystals, Interscience, p.665

(31) SAADA G. (1960) Thèse Paris
BAIRD J.D. et B.GALE (1965) Phil.Trans.Roy.Soc. Londres A 1087, 553
CARRINGTON W.E., HALE K.F. et Mc LEAN D. (1960) Proc.Roy.Soc. A 259, 203

(32) Mc LEAN D. (1962) Mechanical properties of metals, Wiley N.Y.

(33) SAADA G. (1960) Acta Met. 8, 841

(34) GILMAN J.J. (1958) J.Appl.Phys., 29, 747
FRIEDEL J. (1959) Swampscott conference on fracture, Massachussetts

(35) CHRISTIAN J.W. et SWANN P.R. (1965) Alloying behavior and effects in concentrated solid solutions. Gordon et Breach. N.Y. p.105

(36) PEISSKER E. (1964) Thèse, Göttingen

(37) COTTRELL A.H. et BILBY B.A. (1951) Phil.Mag. 42, 573

(38) SEEGER A. (1953) Z.Metallkunde 44, 247 et (1956) 47, 653

(39) WASHBURN J. (1963) Electron microscopy and strength of crystals. Bekeley p.301
GILMAN J.J. et JOHNSTON W.G. (1962) Sol.State Phys. 13, 147

(40) HALL E.O. (1954) Twinning and diffusionless transformations in metals, Butterworths, Londres

(41) GALLAGHER P.C.J. (1966) Phys.Stat.Sol. 16, 95
GALLAGHER P.C.J. et WASHBURN J. (1966) Phil.Mag. 14, 971

(42) FONTAINE G. (1966) Phys.Stat.Sol. 15, 603

(43) THOMPSON N. et MILLARD D.J. (1952) Phil.Mag. 7, 422

(44) POIRIER J.P., ANTOLIN J. et DUPOUY J.M. (1967) Can.J.Phys. 45, 1221

(45) PRICE P.B. (1961) Proc.Roy.Soc. A 260, 251

(46) CONRAD H. (1963) The relation between structure and mechanical properties of metals, Natl.Phys.Lab.Symp. (HMSO Londres) p.475

(47) SLEESWYK A. (1962) Acta.Met. 10, 705.